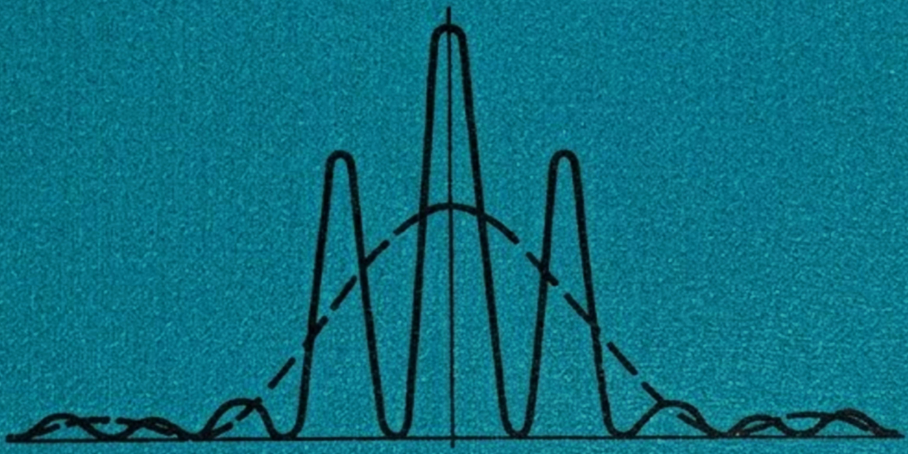
Учебное пособие для педагогических институтов

В. В. Мултановский
А. С. Василевский

# КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ



В. В. Мултановский
А. С. Василевский

# КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

## Квантовая механика

*Допущено Государственным комитетом СССР по народному образованию в качестве учебного пособия для студентов физико-математических факультетов педагогических институтов*

МОСКВА «ПРОСВЕЩЕНИЕ» 1991

ББК 22.314
М90

Рецензенты: кафедра теоретической физики Липецкого педагогического института; профессор, заведующий кафедрой теоретической физики Владимирского педагогического института Д. И. Пениер

**Мултановский В. В., Василевский А. С.**

М90 Курс теоретической физики: Квантовая механика: Учеб. пособие для студентов физ.-мат. фак. пед. ин-тов.— М.: Просвещение, 1991.— 320 с.: ил.— ISBN 5-09-001832-4.

В книге рассматривается одии из разделов кваитовой физики — иерелятивистская кваитовая механика.

Материал изложен в соответствии с программой для педиинститутов и обеспечивает теоретическую основу для преподавания раздела «Кваитовая физика» в школе.

Курс дает возможиость студентам работать самостоятельио по лекциям и практическим заданиям.

**М** $\frac{4309000000-513}{103(03)-91}$ **114—91** **ББК 22.314**

**ISBN 5-09-001832-4**

© Мултановскяй В. В., Василевскии А. С., 1991

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . . 3
Введение . . . . . 4

ГЛАВА I. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ . . . 6

**§ 1. Экспериментальные и теоретические предпосылки квантовой теории** . . 6

1.1. Проблема стабильности атомов и излучения света атомами (6). 1.2. Обнаружение корпускулярных свойств света (8). 1.3. Эффект Комптона (9). 1.4. Открытие дискретных уровней энергии атома (10). 1.5. Полуклассическая теория Бора (11). 1.6. Гипотеза де Бройля (12). 1.7. Корпускулярно-волновой дуализм (13).

**§ 2. Функция состояния** . . . . . 15

2.1. Необходимость вероятностно-статистической интерпретации волн де Бройля (15). 2.2. Невозможность последовательного использования классических представлений о движении частицы (17). 2.3. Волновая функция (функция состояния) (19). 2.4. Принцип суперпозиции состояний (22).

**§ 3. Уравнение Шредингера — основное уравнение квантовой механики** . . 25

3.1. Вид уравнения и общие свойства его решений (25). 3.2. Стационарные состояния (26). 3.3. Плотность потока вероятности (27). 3.4. Закон сохранения числа частиц (29). 3.5. Волновая функция свободного движения частицы (30).

**§ 4. Соотношения неопределенностей** . . . . . 31

4.1. Состояние с неопределенным значением импульса (31). 4.2. Волновой пакет (32). 4.3. Соотношения неопределенностей Гейзенберга (35). 4.4. Соотношения неопределенностей и измерение физических величин (37). 4.5. Соотношение неопределенностей для энергии и времени (40).

Методические указания и рекомендации . . . . . 43
Упражнение I . . . . . 44

ГЛАВА II. ПРОСТЕЙШИЕ ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ . . . . . 46

**§ 5. Задачи на прямоугольные потенциальные барьеры** . . . . . 46

5.1. Финитное и инфинитное движения (46). 5.2. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме (48). 5.3. Прямоугольный потенциальный барьер (51).

**§ 6. Гармонический осциллятор** . . . . . 57

6.1. Постановка задачи (57). 6.2. Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора (57). 6.3. Анализ решения задачи о гармоническом осцилляторе (60). 6.4. Квазиклассическое приближение (62).

Методические указания и рекомендации . . . . . 67
Упражнение II . . . . . 67

ГЛАВА III. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ . . . . . 70

**§ 7. Линейные самосопряженные операторы** . . . . . 70

7.1. Разложение функций в обобщенный ряд и интеграл Фурье (70). 7.2. Линейные операторы (73). 7.3. Собственные функции и собственные значения операторов (75). 7.4. Самосопряженные операторы (75).

**§ 8. Аксиоматика квантовой механики** . . . . . 78

8.1. Математический аппарат квантовой механики (78). 8.2. Операторы и допустимые значения физических величин (78). 8.3. Описание состояния квантовой системы и его изменения со временем (80). 8.4. Вероятности отдельных значений физической величины (83). 8.5. Вычисление средних значений физических величин (84). 8.6. Коммутация операторов — условие существования определенных значений двух физических величин в одном и том же состоянии системы (87). 8.7. О связи математического аппарата квантовой механики с опытом и классической механикой (88). 8.8. К вопросу о размерностях в квантовой механике (90).

**§ 9. Изменение средних зиачений физических величин со временем и законы сохранеиия** . . . . . 91
9.1. Изменение средних значений физических величин со временем (91). 9.2. Уравнения движения в форме Гейзенберга (93). 9.3. Уравнения Эренфеста. Переход от квантовых соотношений к классическим (95). 9.4. Законы сохранения физнческнх величнн в квантовой механике (96). 9.5. Связь законов сохранения с инвариантностью оператора Гамильтона относительно преобразований симметрии (98). 9.6. Связь закоиов сохраиения импульса, момента импульса и энергнн со свойствами пространства и времени (99). 9.7. Четность и закон сохранення четностн (100).
Методические указання н рекомендации . . . . . 103
Упражнение III . . . . . 105
Глава IV. АТОМ ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ СИСТЕМЫ 108
**§ 10. Движеиие в центральио-симметричиом поле** . . . . . 108
10.1. Свойства оператора момента нмпульса и его проекций (108). 10.2. Собственные значения и собственные функцнн операторов $\widehat{L}^2$ и $\widehat{L}_z$ (109). 10.3. Движение частнцы в центрально-симметричном поле (113).
**§ 11. Задача об атоме водорода** . . . . . 115
11.1. Постановка задачн об атоме водорода (115). 11.2. Решение радиального уравнения (116). 11.3. Итогн решення задачи об атоме водорода (120). 11.4. Водородоподобные снстемы (121).
**§ 12. Пространственная структура атома водорода в стациоиариых состояниях** 122
12.1. Угловое и радиальное распределение плотности электронного облака (122). 12.2. Вращение электронного облака (124). 12.3. Орбитальный магнитный момент электрона (127). 12.4. Спектр водорода (129).
**§ 13. Спии электрона** . . . . . 131
13.1. Гипотеза о спине электрона (131). 13.2. Математическое описание спнна электрона (132). 13.3. Спнновые операторы и функцнн (135). 13.4. Описание квантового состояния электрона с учетом его спина (136).
Методические указання и рекомендации . . . . . 138
Упражнение IV . . . . . 139
ГЛАВА V. МЕХАНИКА СИСТЕМЫ МИКРОЧАСТИЦ . . . . . 142
**§ 14. Основиые поиятия и прииципы механики системы микрочастиц** . . . 142
14.1. Волновая функция системы частиц. Операторы фнзических величнн, характеризующнх систему в целом (142). 14.2. Задача двух частиц (144). 14.3. Волновая функция системы невзанмодействующих частиц (145). 14.4. Тождественность частиц одного н того же вида и принцип Паули (148). 14.5. Волновые функции для систем, состоящих из одинаковых бозонов и фермнонов. Запрет Паули (150). 14.6. Обменное взаимодействие (153).
**§ 15. Момент импульса для системы частиц. Правило сложеиия моментов** 154
15.1. Свойства оператора момента импульса снстемы (154). 15.2. Два способа описання системы, состоящей из двух невзанмодействующих частей (156). 15.3. Задача о сложении моментов импульса (157).
**§ 16. Приближенные методы кваитовой механики** . . . . . 162
16.1. Волновые функцин н уровни энергии в первом приближенни теории возмущений (162). 16.2. Уровни энергии во втором приближенни теорнн возмущений (164). 16.3. Теорня возмущений при наличии вырождения (165). 16.4. Тонкая структура спектра атома водорода (167).
Методические указания и рекомендации . . . . . 171
Упражненне V . . . . . 171
ГЛАВА VI. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ . . . . . 172
**§ 17. Атом гелия** . . . . . 173
17.1. Энергия и функцня состояния атома гелия в нулевом прнблнжении теории возмущений (173). 17.2. Классификация состоянн̆ атома гелия. Парагелий н ортогелий (174). 17.3. Уровни энергии атома гелня в первом приблнженин теории возмущений (176). 17.4. Энергня обменного взаимодействня (179).
**§ 18. Структура и состояния миогоэлектрониых атомов** . . . . . 181
18.1. Уровни энергин валеитного электрона в щелочном атоме (181). 18.2.

Теория периодической системы элементов Д. И. Менделеева (183). 18.3. Рентгеновские спектры атомов (187). 18.4. Стационарные состояния и уровни энергии многоэлектронных атомов (187). 18.5. Понятие о методе самосогласованного поля (192).

**§ 19. Понятие о природе химических связей** . . . . . 194

19.1. Расчет энергии связи молекулы водорода по методу Гайтлера — Лондона (194). 19.2. Адиабатическое приближение (198). 19.3. Наглядная интерпретация сил химической связи между атомами (200). 19.4. Силы Ван-дер-Ваальса (203).

**§ 20. Атом в магнитном поле** . . . . . 206

20.1. Магнитный момент атома (206). 20.2. Уровни энергии атома, находящегося в магнитном поле (208). 20.3. Парамагнитные и диамагнитные свойства атомов (210).

Методические указания и рекомендации . . . . . 212
Упражнение VI . . . . . 213

ГЛАВА VII. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ. ИСПУСКАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА АТОМАМИ . . . . . 216

**§ 21. Элементы теории нестационарных возмущений** . . . . . 217

21.1. Функция состояния нестационарной задачи в разложении по стационарным состояниям (217). 21.2. Вычисление коэффициентов разложения при «включении» и «выключении» возмущения (219). 21.3. Вероятность квантовых переходов (222). 21.4. Вероятность переходов в сплошном спектре (224). 21.5. Статистика процесса квантовых переходов (227). 21.6. Квазистационарные состояния. Ширина энергетических уровней (228).

**§ 22. Взаимодействие атомов с электромагнитными волнами** . . . . . 230

22.1. Вероятность перехода атома из одного стационарного состояния в другое под действием электромагнитных волн (230). 22.2. Правила отбора для испускания и поглощения света атомами (232). 22.3. Проявление законов сохранения при излучении света (234). 22.4. Квантование электромагнитного поля (235).

Методические указания и рекомендации . . . . . 240
Упражнение VII . . . . . 241

ГЛАВА VIII. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ . . . . 243

**§ 23. Упругое рассеяние частиц** . . . . . 243

23.1. Дифференциальное и полное сечения рассеяния (243). 23.2. Рассеяние на силовом центре. Амплитуда рассеяния (246). 23.3. Общий вид амплитуды рассеяния на силовом центре (247). 23.4. Определение амплитуды рассеяния в первом приближении теории возмущений (248).

**§ 24. Рассеяние частиц в центральном поле** . . . . . 249

24.1. Сечение рассеяния в борновском приближении (249). 24.2. Формула Резерфорда (251). 24.3. Матрица рассеяния (252).

Методические указания и рекомендации . . . . . 253
Упражнение VIII . . . . . 254

ГЛАВА IX. ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ПОНЯТИЕ О РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ . . . . . 256

**§ 25. Релятивистское волновое уравнение для частиц с нулевым и целым спином** 257

25.1. Границы применимости нерелятивистской квантовой механики и переход в релятивистскую область (257). 25.2. Уравнение Клейна — Гордона — Фока (260). 25.3. Частицы и античастицы (263).

**§ 26. Уравнение Дирака** . . . . . 265

26.1. Матрицы Дирака и уравнение Дирака (265). 26.2. Некоторые свойства решений уравнения Дирака (267). 26.3. Частицы и античастицы, спины частиц и теория Дирака (268).

**§ 27. Квантованное электромагнитное поле** . . . . . 271

27.1. Представление электромагнитного поля в виде системы гармонических осцилляторов (271). 27.2. Квантовые электромагнитные поля (274).

Упражнение IX . . . . . 278
**§ 28. Внутренние симметрии и изотопический спин** . . . . . 279
28.1. Понятие о внутренней симметрии и ее нарушении (279). 28.2. Унитарные симметрии. Изотопический спин (282). 28.3. Группа преобразований $SU(2)$ (284). 28.4. Понятие о $SU(3)$-симметрии (286).
Приложение I. Сингулярная дельта-функция Дирака . . . . . 279
Приложение II. Матрицы и действия с ними . . . . . 279
Прилоджение III. Элементы теории представлений . . . . . 281
Упражнение X . . . . . 306
Литература для дополнительного чтения . . . . . 308

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Квантовая механика является IV частью единого курса теоретической физики для студентов физико-математических специальностей пединститутов. (Часть I — Классическая механика. Часть II — Основы специальной теории относительности. Релятивистская механика.— М.: Просвещение, 1988. Часть III — Классическая электродинамика.— М.: Просвещение, 1990. Часть V — Статистическая физика и термодинамика.— М.: Просвещение, 1985.) Она рассчитана на самостоятельную работу студентов по лекционному курсу и в процессе подготовки к практическим и семинарским занятиям.

При изучении квантовой механики необходимы сведения из классической механики и электродинамики. Ссылки на соответствующие параграфы и формулы в тексте снабжены римской цифрой, указывающей номер части курса.

Для облегчения организации самостоятельной работы все главы курса снабжены методическими указаниями и рекомендациями, адресованными преподавателям и студентам.

Мы стремились в пособии выделить минимальный основной материал — фундаментальные понятия, положения, уравнения и выводы, развить и проиллюстрировать его в примерах и приложениях, снабдить книгу необходимыми для работы дополнительными материалами. Это показано шрифтом и звездочками у параграфов.

Как и в предыдущих частях, при чтении рекомендуется все выкладки проделывать самостоятельно.

## ВВЕДЕНИЕ

В первой и третьей частях данного курса теоретической физики были изложены классическая механика и классическая электродинамика. Эти науки описывают движение и свойства макроскопических объектов. Материальная точка в механике — это, в сущности, большое тело, размерами которого можно пренебречь только по условиям задачи. Анализ основ теории электричества также показывает, что в электродинамике всегда предполагается достаточная интенсивность электромагнитного поля и что оно рассматривается в макроскопических областях пространства-времени. В таких случаях можно не принимать во внимание дискретность строения вещества и поля и особый характер движения и взаимодействия составляющих их микрочастиц.

Специфические закономерности микромира получили название квантовых. Они становятся существенными прежде всего при переходе к явлениям в масштабе одного атома. Здесь кончается область классической физики и начинается квантовая физика. Условный рубеж соответствует расстояниям порядка $10^{-8}$... $10^{-10}$ м и массам частиц порядка $10^{-27}$ кг и меньше.

В четвертой части курса рассматривается только один раздел квантовой физики — *нерелятивистская квантовая механика.* Так называется фундаментальная физическая теория, изучающая движение микрочастиц во внешних силовых полях и взаимодействие микрочастиц при скоростях, далеких от скорости света. Подобные задачи для тел решались в классической механике. Однако в микромире методы классической механики, ее основные уравнения оказываются непригодными. Поведение микрочастиц подчиняется новым законам, а способы их описания требуют других, качественно новых средств.

Типичным предметом исследований в квантовой механике является система частиц, связанных электромагнитным взаимодействием. Сюда относятся атомы и молекулы, газы, жидкости и твердые тела. Сфера действия квантовой механики поистине огромна: она охватывает атомы, молекулы, кристаллы, свойства веществ, множество явлений, происходящих в них. В число явлений, изучаемых в квантовой механике, входят также процессы испускания и поглощения света. (Однако на основе нерелятивистской квантовой механики нельзя дать полную и последовательную теорию этих вопросов.) В тех случаях, когда существенна конечность скорости

распространения взаимодействий, на смену нерелятивистской квантовой механики приходит релятивистская квантовая механика, или квантовая теория поля. Ее наиболее развитой и завершенной частью является квантовая электродинамика.

Квантовая электродинамика изучает электромагнитные взаимодействия между электрически заряженными частицами и электромагнитные поля с точки зрения их микроструктуры. Главным образом в ней рассматриваются взаимодействия между электронами, позитронами и фотонами. Типичными явлениями в этой области являются фотоэффект, эффект Комптона, рождение и аннигиляция электронно-позитронных пар, процессы излучения и поглощения фотонов частицами и системами частиц.

Релятивистская квантовая теория, описывающая частицы, которые участвуют в сильном и слабом взаимодействиях, находится в стадии становления. За последние два десятилетия здесь достигнуты большие успехи: развита теория слабого взаимодействия, которое объединено с электромагнитным в электрослабое взаимодействие; интенсивно разрабатывается квантовая хромодинамика — теория сильного взаимодействия; делаются попытки объединения всех четырех фундаментальных взаимодействий.

По ряду причин квантовая теория поля не изучается в педвузе. Учебная программа включает только нерелятивистскую квантовую механику. Авторы сочли необходимым в конце курса в краткой форме познакомить читателя хотя бы с понятием о релятивистских квантовых уравнениях.

Квантовая механика важна прежде всего тем, что образует фундамент физики атомов и молекул (точнее, их электронной оболочки). Она также является основой физики ядра, электронной теории вещества, физики твердого тела, квантовой химии, квантовой статистики и других областей знания. Но ее значение не исчерпывается одними только приложениями: в силу новизны ряда своих понятий и выводов квантовая механика существенно дополняет миропонимание человека, которое первоначально складывается на основе чувственного опыта восприятия макромира, т. е. квантовая механика важна в общеобразовательном плане. Достаточно указать на некоторые характерные черты в поведении микрочастиц. Это, например, невозможность представления их движения в виде перемещения точки по определенной траектории в пространстве, дискретность ряда физических величин — параметров механического состояния, наличие скачкообразных изменений состояния, минующих промежуточные стадии.

Квантовая механика является сравнительно молодой наукой. Наблюдения, эксперименты и теоретические исследования, послужившие толчком к пересмотру классической физики, относятся к концу прошлого — началу нашего века. Первые шаги квантовая теория сделала между 1910 и 1925 гг. Создание последовательной теории произошло в период с 1926 по 1930 г. Становление квантовой механики связано с именами целого ряда ученых, среди которых в первую очередь следует назвать М. Планка, Л. де Бройля, А. Эйн-

штейна, Н. Бора, В. Гейзенберга, П. Дирака, В. Паули, Э. Шредингера, М. Борна и др.

Потом последовал период углубленного физического и философского анализа основ квантовой теории, разработка ее расчетных методов, разнообразных приложений. Существенный вклад в науку здесь внесли советские ученые Л. Д. Ландау, В. А. Фок, И. Е. Тамм, Я. И. Френкель, Л. И. Мандельштам, Н. Н. Боголюбов и многие другие.

Квантовая физика достигла расцвета в современную эпоху научно-технического прогресса: осуществлен прорыв в область элементарных частиц, следующую за атомом и ядром; открыты новые явления, нашедшие широчайшее применение в науке и технике; можно назвать полупроводники, лазеры, высокотемпературную сверхпроводимость, обещающую хорошие перспективы. Фундамент же квантовой физики — квантовая механика.

В какой связи находится теоретическая физика с задачами подготовки учителя средней школы, говорилось в общем введении ко всему курсу теоретической физики (см. ч. I). Известно, что квантовая механика дает теоретические знания для преподавания в школе раздела «Квантовая физика», готовит студентов к восприятию ядерной физики и электронной теории вещества, формирует физическое миропонимание, расширяя представления *о* мире от макро- до микрокартин.

# ГЛАВА I. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика возникла на основе изучения физических явлений, объяснение которых в рамках классических представлений оказалось невозможным. В первой главе этой книги рассматриваются наиболее существенные из этих явлений и в элементарной форме излагаются новые по отношению к классическим квантовые понятия и законы микромира.

## § 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

**1.1. Проблема стабильности атомов и излучения света атомами.** В начале XX в. было открыто, что атомы состоят из ядра и электронов, и была предложена планетарная модель атома. Согласно ее положениям строение самого простого атома — водородного — выглядело так: точечное ядро, масса которого почти в 2 тыс. раз больше массы электрона, вокруг ядра как вокруг неподвижного притягивающего центра обращается электрон. Он удерживается в атоме силой электростатического кулоновского притяжения. По законам

классической механики возможны устойчивые связанные состояния такой системы; они соответствуют движению по замкнутым эллиптическим орбитам. Если исходить из уравнения второго закона Ньютона, то для движущегося электрона получим равенство

$$ma_n = F,$$

или

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{\varkappa e^2}{r^2}, \tag{1.1}$$

где для сокращения записи введена постоянная $\varkappa = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$.

Движение электрона является ускоренным. Но согласно макроскопической электродинамике всякий ускоренно движущийся заряд излучает электромагнитные волны (см. ч. III, § 8). Полная мощность излучения определяется формулой (8.15) (см. ч. III). Используя равенство (1.1), имеем

$$N = \frac{2\varkappa^3 e^6}{3c^3 m^2 r^4}.$$

Оценка по известным данным размеров атома и входящих в формулу констант ($r \sim 10^{-10}$ см) дает величину $N$ порядка $10^{-7}$ Дж/с. Это огромная мощность по сравнению с запасом энергии электрона, имеющей величину порядка $10^{-13}$ Дж. Значит, атом за время, равное около $10^{-6}$ с, израсходует всю энергию на излучение, и электрон упадет на ядро.

Проблема имеет совершенно общий характер: любая классическая система, состоящая из заряженных частиц, не может находиться в статическом равновесии. А динамическое равновесие связано с движением частиц в ограниченной области пространства, которое всегда является ускоренным. Ускоренное же движение сопровождается излучением. Отсюда следует вывод о нестабильности вещества, что противоречит общеизвестным фактам: устойчивости и постоянству свойств отдельных атомов и молекул, а также состоящих из них газов, жидкостей и твердых тел.

Итак, наблюдения показывают, что атомы в невозбужденном состоянии не испускают электромагнитные волны. Излучение имеет место при переходе атома из возбужденного состояния в его основное состояние. Кроме того, с точки зрения классической механики изменение скорости движения электрона должно приводить к образованию сплошного спектра или, по крайней мере, к изменению частоты излучения. Но ко времени создания квантовой теории был накоплен огромный материал спектроскопических наблюдений, согласно которым атомы имеют строго определенные и постоянные, специфические для каждого сорта частоты излучения.

Например, для водорода все линии спектра описываются эмпирической формулой

$$\nu = R_0\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \tag{1.2}$$

где $R_0$ — некоторая постоянная, а $n$ и $m$ принимают значения, равные числам натурального ряда, причем $m > n$.

Устойчивость атомов, а также линейчатый характер их спектров (не говоря уже о значениях конкретных частот спектральных линий) с помощью классической механики и классической электродинамики объяснить не удалось. Изучение проблемы строения атома как системы из ядра и электронов, связанных электромагнитными взаимодействиями, стимулировало поиски новых закономерностей движения в микромире, что в конечном счете и привело к созданию современной квантовой теории.

**1.2. Обнаружение корпускулярных свойств света.** Впервые теоретические трудности в объяснении взаимодействия света с веществом возникли еще до обсуждения планетарной модели атома, описанной выше. В конце прошлого века интенсивно исследовалось излучение абсолютно черного тела. Из термодинамических соображений следовало, что распределение интенсивности в спектре теплового излучения абсолютно черного тела не должно зависеть от его строения. Это позволяло в теоретических исследованиях использовать очень простую модель вещества: реальные атомы и молекулы заменялись системой гармонических осцилляторов, способных излучать и поглощать электромагнитные волны. Расчеты удавалось провести до конца, но согласия с экспериментальными данными не было. Более того, получался физически нелепый результат: бесконечная суммарная интенсивность излучения.

Для решения указанной проблемы М. Планк в 1900 г. выдвинул гипотезу о дискретности уровней энергии атомных систем. В частности, если предположить, что энергия осциллятора принимает следующие дискретные значения, квантуется по формуле

$$\varepsilon = nh\nu,$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$; $\nu$ — частота колебаний осциллятора, а $h$ — некоторая постоянная, то можно вывести теоретически все известные эмпирические законы излучения черных тел. Современное значение константы: $h = 6{,}626176 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Эта фундаментальная константа квантовой физики носит название постоянной Планка.

Идея М. Планка была подхвачена А. Эйнштейном. В 1907 г. с ее помощью он сумел объяснить зависимость теплоемкости твердых тел от температуры. Из планковской гипотезы следовало также, что осциллятор поглощает и излучает свет порциями — квантами — величиной $h\nu$. Далее представление о квантах получило более определенный физический смысл. Эйнштейн предположил, что и свободное электромагнитное поле состоит из элементарных частиц (фотонов), энергия и импульс которых определяются формулами

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \tag{1.3}$$

Здесь $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}0545887 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — так называемая приведенная постоянная Планка; $\omega = 2\pi\nu$ — циклическая частота; $\vec{k}$ — волно-

вой вектор, модуль которого называется волновым числом $\left(k=\frac{\omega}{c}=\right.$ $\left.=\frac{2\pi}{\lambda}\right)$, по направлению совпадающий с направлением распространения фронта волны.

Квантование электромагнитного поля позволило Эйнштейну в 1905 г. объяснить законы фотоэффекта. (Формулу Эйнштейна для фотоэффекта мы изучаем теперь в средней школе.)

Корпускулярные представления о свете скоро получили и другие экспериментальные подтверждения. В 1923 г. А. Комптон и П. Дебай использовали гипотезу о фотонах для объяснения эффекта Комптона (см. ниже). После этих работ гипотеза о квантах света прочно вошла в современную физику и в дальнейшем получила свое теоретическое обоснование в рамках квантовой электродинамики.

**1.3. Эффект Комптона.** Эффект Комптона состоит в изменении частоты электромагнитных волн при рассеянии их на свободных электронах. В элементарной теории этого эффекта свет рассматривается как поток частиц.

Пусть имеет место столкновение фотона с неподвижным электроном. При соударении фотон теряет часть энергии. При этом изменяются частота волны и направление ее распространения. Электрон приобретает импульс и кинетическую энергию. Применяя законы сохранения энергии и импульса, получаем равенства

$$\left.\begin{aligned} &\hbar\omega_1+mc^2=\hbar\omega_2+\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}},\\ &\vec{p}_1=\vec{p}_2+\frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \end{aligned}\right\} \tag{1.4}$$

где $\vec{v}$ — скорость электрона после столкновения; $\vec{p}_1$ и $\vec{p}_2$ — начальный и конечный импульсы фотона; $\omega_1$ и $\omega_2$ — частоты излучения до и после столкновения.

Чтобы получить связь между $\omega_1$ и $\omega_2$, необходимо исключить из уравнений (1.4) скорость электрона. С этой целью совершим ряд преобразований. В итоге получаем соотношения

$$\left.\begin{aligned} &\frac{1}{c^2}(\hbar\omega_1-\hbar\omega_2+mc^2)^2=\frac{m^2c^2}{1-\frac{v^2}{c^2}},\\ &(\vec{p}_1-\vec{p}_2)^2=\frac{m^2v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}}. \end{aligned}\right\} \tag{1.5}$$

Вычитая из первого равенства (1.5) второе, имеем

$$\frac{1}{c^2}(\hbar\omega_1-\hbar\omega_2+mc^2)^2-(\vec{p}_1-\vec{p}_2)^2=m^2c^2. \tag{1.6}$$

Пусть $\Theta$ — угол между векторами $\vec{p}_1$ и $\vec{p}_2$. Раскроем скобки в равенстве (1.6) и учтем, что

$$p_1=\frac{\hbar\omega_1}{c},\quad p_2=\frac{\hbar\omega_2}{c}.$$

После простых выкладок находим

$$\omega_1 - \omega_2 = \frac{\hbar\omega_1\omega_2}{mc^2}(1 - \cos\Theta). \qquad (1.7)$$

Поскольку $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, формула (1.7) может быть представлена в виде

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\Theta). \qquad (1.8)$$

Выражение (1.8) правильно передает изменение длины волны при рассеянии рентгеновского излучения на электроне, обнаруженное А. Комптоном в опыте в 1922 г. Это убедительное свидетельство корпускулярных свойств света. Действительно, при теоретическом расчете и фотон, и электрон уподоблялись точечным объектам. Если же использовать волновые представления, то нельзя понять, почему импульс и энергия волны сосредоточиваются в одной точке, почему волна взаимодействует только с одним электроном. Волновая теория — классическая электродинамика — для свободного заряда дает ту же частоту для рассеянных волн, что и для падающих.

**1.4. Открытие дискретных уровней энергии атома.** Дж. Франк и Г. Герц в 1914 г. изучали столкновения электронов с атомами ртути. Было обнаружено два вида соударений: упругое, без изменения энергии электрона, и неупругое, сопровождающееся потерей строго определенного количества энергии. Отсюда следовало, что атому сообщается при столкновении всегда одна и та же порция энергии. Этот результат можно истолковать только следующим образом: неупругие столкновения соответствуют переходу между двумя дискретными энергетическими состояниями, энергия атомов изменяется дискретно. Измерение величины передаваемой энергии позволило определить разность между энергией нижнего основного и первого возбужденного состояния. Для ртути она оказалась равной 4,9 эВ. Затем были обнаружены и более высокие уровни энергии.

Дискретность значений энергии атома полностью согласуется с линейчатым характером его спектра. Пусть уровни энергии атома водорода определяются соотношениями

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2}, \quad Ry = hR_0. \qquad (1.9)$$

Если при переходе из одного энергетического состояния в другое испускается (поглощается) квант света с частотой

$$\nu = \frac{1}{h}(E_{n_2} - E_{n_1}),$$

то мы приходим к формуле (1.2), т. е. объясняем происхождение линейчатого спектра.

Квантование энергии микроскопической системы частиц получило надежное подтверждение и во многих других опытах. Однако само представление о дискретных уровнях энергии находится в глубоком противоречии с классической механикой. По ее законам энергия час-

тицы в силовом поле или системы взаимодействующих частиц — непрерывная величина, и нет правил, выделяющих отдельные ее значения из непрерывной их последовательности.

**1.5. Полуклассическая теория Бора.** В 1913 г. Н. Бор разработал первую квантовую теорию атома водорода, позволившую объяснить дискретность уровней энергии атома и вывести формулу для частот спектральных линий.

Теория Бора называется полуклассической. С одной стороны, в ней допускается использование классической механики для описания движения электрона, с другой — вводятся новые положения, противоречащие классической физике. Это квантовые постулаты Бора:

1) *Существуют стационарные состояния атома, в которых он не излучает и не поглощает энергию.*

2) *Излучение и поглощение энергии атомом происходит при скачкообразном переходе из одного стационарного состояния в другое.*

Если $\varepsilon$ — излученная (поглощенная) энергия, то $\varepsilon = E_{n_2} - E_{n_1}$, где $n_2$ и $n_1$ — номера квантовых состояний.

Для выделения стационарных состояний из непрерывного множества состояний движения, которые имеют место согласно классической механике, служит правило квантования момента импульса: модуль момента на стационарной орбите определяется по формуле

$$mvr = n\hbar. \tag{1.10}$$

Квантовое число $n$ принимает значения 1, 2, 3, ...

Приведенных положений достаточно, чтобы установить радиус стационарной орбиты, энергию стационарного состояния электрона в атоме и вывести спектральную формулу (1.2). Используя выражение (1.1), вытекающее из второго закона Ньютона, и правило квантования (1.10), получаем радиус круговой стационарной орбиты:

$$r_n = an^2, \quad a = \frac{\hbar^2}{\varkappa m e^2} \simeq 5{,}3 \cdot 10^{-11} \text{ м}. \tag{1.11}$$

Энергия электрона находится из соотношения

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{\varkappa e^2}{r} = -\frac{\varkappa e^2}{2r}.$$

Подставляя сюда значение радиуса $r_n$, имеем

$$E_n = -Ry\frac{1}{n^2}, \quad Ry = \frac{m\varkappa^2 e^4}{2\hbar^2} \simeq 13{,}6 \text{ эВ}, \tag{1.11а}$$

что для частоты излучения приводит к формуле (1.2), если $R_0 = \frac{Ry}{h}$.

Далее нетрудно выразить спектроскопическую постоянную $R_0$ в формуле (1.2) через значения физических констант. Хорошее совпадение теоретического результата с экспериментальным ее значением (до 7...8 значащих цифр) явилось триумфом теории Бора и свидетельствовало о правомерности ее постулатов.

Для большей точности необходимо учесть движение ядра. С этой

целью вместо массы электрона нужно использовать приведенную массу атома:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}.$$

Эвристическое значение теории Бора состоит в смелом предположении о существовании стационарных состояний и скачкообразных переходов между ними. Эти положения позднее были распространены и на другие микросистемы. Подбирая те или иные правила квантования, удалось найти уровни энергии многих простых систем. В частности, для периодического одномерного движения Бором была предложена формула

$$\oint p(q)\, dq = 2\pi\hbar n. \qquad (1.12)$$

Здесь $q$ — обобщенная координата; $p$ — обобщенный импульс, сопряженный этой координате. Интеграл берется по фазовой траектории $p(q)$ (см. ч. I, § 25, п. 2).

Теория Бора, детально разработанная А. Зоммерфельдом, получила широкое распространение в период между 1913 и 1925 гг., но ее временный переходный характер был ясен с самого начала. Противоречивость исходных положений, неспособность объяснить строение многоэлектронных атомов — все это указывало на то, что эта теория являлась недостаточно последовательной и общей. Поэтому она в дальнейшем была заменена современной квантовой механикой, основанной на более общих и непротиворечивых исходных положениях.

Сейчас известно, что постулаты Бора являются следствиями более общих квантовых законов. Но правила квантования типа (1.10), (1.12) широко используются и в наши дни как приближенные соотношения: их точность часто бывает очень высокой (см. § 6, п. 4).

**1.6. Гипотеза де Бройля.** Явления дифракции и интерференции света свидетельствуют о его волновой природе, в то время как фотоэффект и эффект Комптона — о корпускулярной. Приходится считаться с этой двойственностью света — его *корпускулярно-волновым дуализмом.*

В 1923 г. Л. де Бройль высказал идею, что такой *корпускулярно-волновой дуализм свойствен не только свету, но и материальным телам.* Он полагал, в частности, что свободной частице следует сопоставить плоскую монохроматическую волну, причем волновые параметры — частота $\omega$ и длина волны $\lambda$ — связаны с механическими характеристиками — импульсом $\vec{p}$ и энергией $\varepsilon$ — соотношениями (1.3)

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \qquad (1.13)$$

Гипотеза де Бройля получила вскоре надежное экспериментальное подтверждение. В 1923 г., наблюдая рассеяние пучка электронов на поверхности кристалла, К. Дэвиссон и Кунсман обнаружили

дифракционные максимумы. Позднее, в 1927 г., Дэвиссон и Л. Джермер подтвердили этот результат в опытах, поставленных специально для обнаружения волновых свойств электронов.

В настоящее время после многочисленных экспериментов, теоретических исследований и их практических применений хорошо известно, что любые частицы — фотоны, электроны, протоны, целые атомы и молекулы — при подходящих условиях обнаруживают волновые свойства. Но для наблюдения, например дифракции, необходимо, чтобы пучок частиц встречал на своем пути препятствия, размеры которых соизмеримы с длиной волны де Бройля, сопоставляемой отдельной частице в соответствии с формулами (1.13). Существуют также явления, обусловленные интерференцией волн де Бройля.

Известно, что интерференция и дифракция свойственны только волновым процессам и не могут иметь место при движении и взаимодействии корпускул — материальных точек классической механики. Следовательно, микрочастицы проявляют волновые свойства.

Гипотеза де Бройля ничего не говорит о природе «волн материи». Как будет показано далее, волны де Бройля нельзя рассматривать как волны в какой-то материальной среде. Их физический смысл еще предстоит выяснить.

**1.7. Корпускулярно-волновой дуализм.** Вспомним две основные модели материальных объектов, применяющиеся в классической механике и электродинамике.

При изучении движения материальной точкой заменяют тела, размерами которых можно пренебречь по сравнению с расстояниями между ними. В каждый момент времени $t$ материальная точка находится в определенной точке пространства с координатами $x$, $y$, $z$. Движение ее описывается кинематическим уравнением

$$\vec{r}=\vec{r}\,(t) \tag{1.14}$$

и происходит по определенной траектории. В каждой точке траектории может быть определена скорость:

$$\vec{v}=\dot{\vec{r}}\,(t).$$

Кроме тел, классическая физика имеет дело с полями. Например, электромагнитное поле — это вид материи, непрерывно распределенной в пространстве. Поле задается с помощью некоторых характеристик в каждой его точке в каждый момент времени. Они называются полевыми величинами. Основными полевыми величинами для электромагнитного поля служат напряженность электрического поля: $\vec{E}=\vec{E}\,(\vec{r},\ t)$ — и индукция магнитного поля: $\vec{B}=\vec{B}\,(\vec{r},\ t)$.

Движение поля — это изменение его характеристик с течением времени в каждой точке пространства. В этом отношении весьма характерен волновой характер изменения поля. В конечном счете любые волны сводятся к набору простейших — плоских монохроматических волн:

$$\psi\,(\vec{r},\ t)=Ae^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}. \tag{1.15}$$

Сопоставляя материальную точку и волновое поле, следует сопоставлять уравнение (1.14) с выражением (1.15). В известной мере две рассмотренные сейчас модели материи — точка и волна — обладают исключающими друг друга свойствами. Так, точка — объект локальный: в ней сосредоточены масса тела, энергия, импульс, заряд (если тело заряжено). Волна же непрерывно распределена в пространстве (плоская волна занимает все бесконечное пространство). Непрерывно распределены в волновом поле энергия и импульс. Если движение материальной точки исчерпывающе описывается траекторией и скоростью, то для волны можно указать движение фронта, потоки энергии и импульса, но о траектории в общем случае речь не идет.

Таким образом, для описания того или иного материального объекта должен быть сделан альтернативный выбор: один и тот же объект не может описываться моделью материальной точки и волны.

Однако корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц налицо как совокупность экспериментальных фактов. С одной стороны, электроны, протоны, ядра веществ и другие микрообъекты имеют очень малые размеры, т. е. масса, импульс, энергия, электрический заряд у них локализованы в малых областях пространства. Поэтому по сравнению с расстояниями между частицами последние во многих случаях принимаются за точечные. С другой стороны, при взаимодействии между собой и с макротелами микрочастицы ведут себя как волны (наблюдаются дифракция, интерференция). Это значит, что микрочастицы не могут моделироваться материальными точками, движущимися по определенным траекториям, и не могут моделироваться волнами с непрерывно распределенными в пространстве энергией и импульсом.

Для описания движения микрочастиц и их взаимодействия между собой и с макротелами с помощью математических средств необходим некий синтез их корпускулярных и волновых свойств. Он достигается в истолковании природы волн, соответствующих микрочастицам. Как уже указывалось, это не волны материальной среды. Согласно идее, высказанной в 1926 г. М. Борном, квадрат модуля функции $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, описывающей «волны материи», в общем случае пропорционален вероятности обнаружения частицы в точке пространства $\vec{r}$ в момент времени $t$. Эта интерпретация волн, описывающих движение и взаимодействие микрочастиц, сейчас является общепринятой.

Заключая краткий обзор экспериментов и теоретических положений, исторически предваряющих квантовую механику, заметим, что мы обсудили лишь некоторые моменты на пути ее создания, позволяющие в какой-то степени обозреть весь путь. Фактически вся совокупность важнейших открытий в физике конца XIX — начала XX в. есть экспериментальное основание квантовой теории (о структуре теории см. введение, ч. I). Это открытие электрона и явления радиоактивности, рентгеновских лучей, спина электроиа и др. Теоретическое обобщение — формирование ядра теории в ее современном виде — было сделано Э. Шредингером и В. Гейзенбергом в 1926—

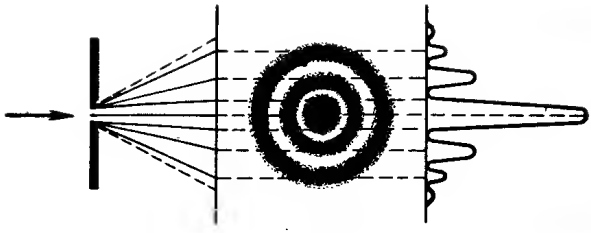


Рис. 1.1.

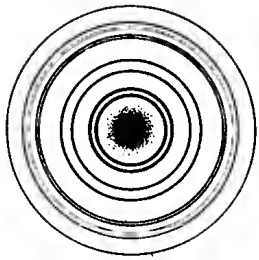


Рис. 1. 2. Дифракция пучка электронов на тонкой поликристаллической серебряной пластинке.

1927 гг. Помимо них крупный вклад в разработку теории внесли В. Паули, П. Дирак и еще большая группа физиков разных стран. В эту группу, в частности, входят советские ученые В. А. Фок и Л. Д. Ландау.

## § 2. ФУНКЦИЯ СОСТОЯНИЯ

**2.1. Необходимость вероятностно-статистической интерпретации волн де Бройля.** Продолжим обсуждение волновых свойств микрочастиц. Как показывает опыт, можно наблюдать дифракцию электронов при отражении пучка этих частиц от кристалла. Однако при выяснении принципиальных особенностей поведения частиц нет необходимости изучать это сложное явление во всех его деталях и подробностях. Можно остановиться на дифракционной решетке более простого типа или даже ограничиться исследованием прохождения электронов через одно отверстие в диафрагме. Правда, такой опыт нельзя поставить в действительности. Но если мы будем при теоретическом анализе некоторой физической ситуации исходить только из твердо установленных закономерностей, то наши выводы не разойдутся с истиной. Мысленные эксперименты широко используются в физике. Как правило, они представляют собой весьма идеализированные схемы настоящих опытов. Это позволяет освободиться от несущественных моментов и сосредоточить внимание на главном — на том, что требуется изучить в первую очередь.

Итак, допустим, что пучок частиц падает на диафрагму с маленьким круглым отверстием посередине. Для определенности будем говорить об электронах. За диафрагмой и параллельно ей поставим экран (рис. 1.1). Опираясь на гипотезу де Бройля, можно предсказать, что произойдет, если электроны пройдут через отверстие. Предположим, что размеры отверстия соизмеримы с длиной волны де Бройля. Тогда должна наблюдаться дифракция волн. Если вместо экрана установить фотопластинку, то, выждав нужное для экспозиции время, мы получим дифракционную картину в виде темного круглого центрального пятна и бледных концентрических колец вокруг него. Реальные опыты по дифракции электронов при прохождении через тонкую поликристаллическую фольгу дают

похожую дифракционную картину, изображенную на рисунке 1.2. В этом проявляется волновая природа электрона.

Поставим вопрос: обладает ли волновыми свойствами отдельная частица или только весь пучок в целом?

Большинство физиков с самого начала полагали, что волновые свойства присущи каждому электрону в отдельности. Это подтверждено прямым экспериментом, поставленным в 1949 г. советскими учеными Л. М. Биберманом, П. П. Сушкиным и В. А. Фабрикантом. Наблюдалось прохождение электронов через кристалл, играющий роль дифракционной решетки. Частицы проходили через установку поочередно в определенный интервал времени. После длительной экспозиции была получена такая же дифракционная картина, как и при прохождении многих электронов одновременно через кристалл.

Далее закономерен следующий вопрос: дает ли каждый электрон всю дифракционную картину или он создает почернение только в одной точке фотопластинки?

Макроскопическая электромагнитная волна, например, дифрагируя на отверстии, разделяется на ряд пучков, идущих в различных направлениях и соответствующих максимумам дифракционной картины. Энергия волны дробится на несколько частей. Что же происходит с отдельной микрочастицей?

Если электрон — волна, то он должен в аналогичной ситуации разделиться на части, но если электрон — частица, сохраняющая свою целостность при прохождении отверстия, то разделиться на части он не может. Взаимодействие с диафрагмой может изменить направление его движения, но после прохождения отверстия электрон попадает в одну конкретную точку экрана.

Ответ должен дать реальный эксперимент: нужно, чтобы экран представлял собой совокупность детекторов, улавливающих отдельные частицы и измеряющих их массы и заряды. Такие опыты технически возможны и дают однозначный результат: заканчивая движение, каждая частица попадает в определенную точку экрана. Поэтому и в нашем мысленном опыте, где рассматривалось прохождение частиц через отверстие в диафрагме, каждый отдельный электрон будет вызывать почернение фотопластинки на небольшом участке.

Одна частица не создает дифракционной картины. Всю картину можно получить только благодаря попаданию на пластинку пучка частиц. Электрон не делится на части и полностью сохраняет свою целостность, т. е. свой заряд, массу и другие характеристики.

В этом проявляются корпускулярные свойства микрочастиц. В то же время налицо и проявление волновых свойств. Электрон после прохождения отверстия никогда не попадает на экран в том месте, где должен быть минимум дифракционной картины. Он может оказаться в точках экрана только вблизи дифракционных максимумов. При этом указать, в каком именно конкретном направлении полетит данная частица, в какую точку экрана она попадет, заранее нельзя.

Если взять много частиц, то по почернению фотопластинки об-

наружится закономерность: большая часть электронов попадает в область главного максимума; количество частиц, приходящихся на другие максимумы, убывает по мере возрастания номера (порядка) максимума. Для отдельной частицы нельзя указать конкретную точку, но можно предсказать вероятность ее попадания в то или иное место экрана.

Из результата опыта вытекает правило: *вероятность попадания электрона пропорциональна интенсивности волны, т. е. квадрату амплитуды волнового поля в данном месте экрана.* Обобщая это положение, приходим к вероятностно-статистическому толкованию природы волн, связанных с микрочастицами: *закономерность распределения микрочастиц в пространстве имеет статистический характер, т. е. однозначные выводы можно сделать для большого количества частиц; для одной частицы можно определить только вероятность попадания в определенную область.*

Вероятностно-статистическое толкование волновых свойств микрочастиц в известной мере разрешает противоречие в сочетании их корпускулярных и волновых свойств. Волны, связанные с микрочастицами, не представляют собой материального волнового поля, амплитуда которого была бы измеряемой физической величиной (как это, например, имеет место для электромагнитного поля). Функция $\psi(\vec{r}, t)$, выражающая волну, позволяет при таком толковании определить вероятность того или иного положения точечной частицы в пространстве.

Надо отметить, что волновое поле микрочастицы или системы микрочастиц только в случае невзаимодействующих микрочастиц есть волна де Бройля (1.15). При взаимодействии частиц между собой и с макроскопическими телами волновое поле иное и выражается разнообразными функциями координат и времени. Вероятностно-статистическое же толкование функции $\psi(\vec{r}, t)$ применяется всегда.

**2.2. Невозможность последовательного использования классических представлений о движении частицы.** Хотя волны, связанные с микрочастицами, не являются материальными, волновые свойства микрочастиц вполне объективны и непосредственно наблюдаемы. Вид волнового поля, связанного с частицей, определяется ее свойствами и наличием других микроскопических и макроскопических объектов, с которыми частица взаимодействует.

Попробуем установить, какой будет дифракционная картина, если пучок электронов падает на диафрагму с двумя отверстиями. Казалось бы, что возможен такой ответ: каждый электрон проходит через одно отверстие; поэтому на экране появится дифракционная картина, которая получится в результате простого наложения картин дифракции на первом и втором отверстиях.

Но в действительности ответ иной. Картина, получаемая при дифракции электронов на двух щелях, имеет вид колец, расположенных вокруг центрального максимума. На рисунке 1.3 изображена соответствующая диаграмма распределения интенсивности. Она напоминает диаграмму дифракции на одном отверстии, только радиусы колец другие.

Такой результат можно понять с волновой точки зрения, если считать, что с электроном связано волновое поле. Тогда дифракция электронов происходит по тем же законам, что и дифракция электромагнитных волн. В нашем мысленном опыте картина должна совпадать с картиной дифракции света на двух отверстиях (при той же длине волны, расположении и размерах отверстий). Однако такой чисто волновой подход не исчерпывает всех сторон опыта в силу наличия корпускулярных свойств у частиц, как об этом говорилось выше. Попробуем представить

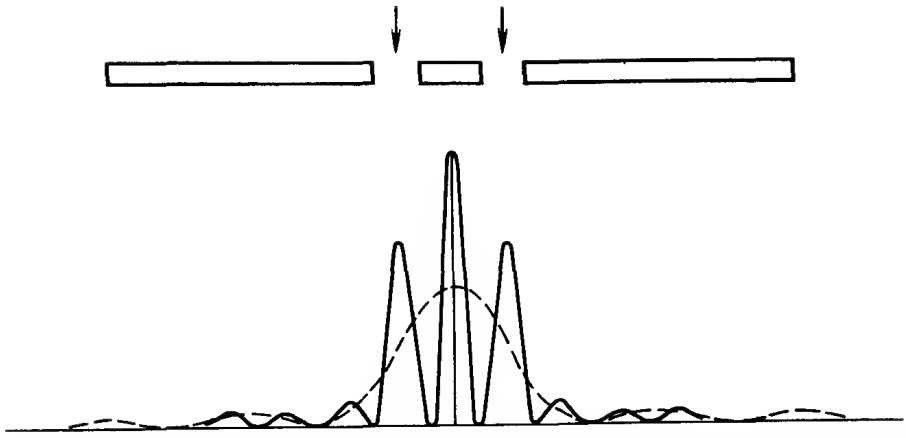


Рис. 1.3. Распределение интенсивности дифракционной картины на двух отверстиях. (Пунктир показывает наложение картин, образованных независимо от каждого отверстия.)

частицу в виде движущейся материальной точки. Результаты опыта с двумя щелями можно объяснить в рамках корпускулярной модели, предположив, что электрон проходит сразу через два отверстия или, проходя через одно отверстие, он каким-то способом «узнает» о существовании другого отверстия, которое сказывается на его движении.

Из рассмотренных мысленных опытов вытекает невозможность последовательного использования в микромире классических представлений частицы-корпускулы и частицы-волны. Тот и другой подход не позволяет объяснить все стороны явления с единой точки зрения. Классические представления в лучшем случае имеют ограниченную применимость, позволяя в более или менее наглядной форме описать некоторые детали опытов. Но это не означает, что от них следует отказаться полностью.

Мы уже познакомились с единой вероятностно-статистической трактовкой волнового поля микрочастиц. Для описания поведения микрочастиц в квантовой механике выработаны специальные математические средства, подробно изучающиеся далее. Они имеют абстрактный характер и часто лишены наглядности. Между тем человеческое мышление образное, и предмет размышлений считается понятым тогда, когда мы сумеем его представить в достаточно наглядных понятиях и образах. Наглядными же мы считаем те представления, которые привычны нам с детства. Все они имеют корни в окружающем нас мире макроскопических тел. Свойства и движение последних описывает классическая физика. Дуализм корпускулярно-волновых свойств и соответствующая ему вероятностно-статистическая трактовка волн микрочастиц классической наглядностью не обладают. И самое главное здесь заключается в том, что в модели микрочастицы как точечного объекта утеряно основное свойство материальной точки — движение по определенной траектории. В модели же классической волны, применяемой к микрочастице, вместо непрерывного распределения материи в пространстве имеет место ее локализация в точечном объекте — микрочастице.

По этой причине ни модель материальной точки, ни модель волны материальной среды полностью к микрочастице неприменимы. В поведении микрообъектов всегда есть две стороны: корпускулярная и волновая. В одной ситуации поведение частицы сходно с движением или взаимодействием классической корпускулы, в другой — с процессом распространения волн или с картиной стационарного поля. На передний план могут выступать или корпускулярные, или волновые свойства. Взятые в диалектическом единстве корпускулярные и волновые свойства частиц дополняют друг друга, давая в совокупности полное представление о поведении микрочастицы. В этом состоит один из аспектов выдвинутого Н. Бором принципа дополнительности.

В квантовой механике необходимый синтез корпускулярных и волновых представлений достигается через использование понятия о волновой функции.

**2.3. Волновая функция (функция состояния).** После знакомства с корпускулярными и волновыми свойствами микрочастиц ясно, что для описания механического состояния микрочастицы непригодны те методы, которые используются в классической физике. В квантовой механике нужно применять для описания состояния новые специфические средства. Важнейшим из них является понятие о волновой функции, или функции состояния (она называется также $\psi$-функцией).

Функция состояния есть математический образ того волнового поля, которое следует связывать с каждой частицей. Например, согласно гипотезе де Бройля со свободной частицей связывается плоская монохроматическая волна (см. формулу (1.15)). В общем случае это поле может иметь весьма сложный вид, и оно изменяется с течением времени. Волновая функция зависит от параметров микрочастицы и от тех физических условий, в которых последняя находится.

Далее мы увидим, что через волновую функцию достигается наиболее полное описание механического состояния микрообъекта, какое только возможно в микромире. Зная волновую функцию, можно предсказать, какие значения всех измеряемых величин будут наблюдаться на опыте и с какой вероятностью. Функция состояния несет всю информацию о движении и квантовых свойствах частиц, поэтому говорят о задании с ее помощью квантового состояния.

Сейчас начнем с важнейшего вопроса о том, как задается в квантовой механике положение частицы в пространстве.

Пусть $\psi(x, y, z, t)$ — известная волновая функция. Тогда вероятность обнаружения частицы в момент времени $t$ в элементарном объеме $dV$ около точки с координатами $x$, $y$, $z$ *определяется формулой*

$$dW = |\psi|^2 dV. \tag{2.1}$$

При этом частица представляется в виде точки, в которой сосредоточены ее масса, импульс и энергия.

Из уравнения (2.1) следует

$$\frac{dW}{dV} = w = |\psi|^2. \tag{2.2}$$

Квадрат модуля волновой функции есть *плотность вероятности* для местонахождения частицы (поэтому $\psi$-функцию называют также амплитудой вероятности).

В определениях (2.1) и (2.2) и заключен физический смысл функции состояния, ибо посредством измерений можно найти только величины $dW$ и $w$.

Функция состояния $\psi(x, y, z, t)$ является комплексной: квадрат

ее модуля выражается формулой

$$|\psi|^2=\psi^*\psi,$$

где звездочка обозначает комплексное сопряжение.

Комплексная функция всегда может быть представлена в виде

$$\psi=R(x, y, z, t)\, e^{i\alpha(x, y, z, t)}. \qquad (2.3)$$

Здесь $R(x, y, z, t)$ — модуль функции, а $e^{i\alpha(x, y, z, t)}$ называется фазовым множителем.

Из формул (2.1) и (2.3) следует, что волновая функция определена неоднозначно, а с точностью до произвольного фазового множителя. Действительно, умножение функции на экспоненту $e^{i\beta}$ изменяет фазу комплексной функции $\psi(x, y, z, t)$, но не ее модуль, что не приводит к изменению измеряемой величины $w$.

Указанную особенность функции состояния не следует рассматривать как недостаток теории. Всегда нужно помнить, что волновая функция есть математический объект. Ее даже нельзя найти экспериментально прямым измерением. Непосредственно измеримой характеристикой является величина $|\psi|^2$, а она задана однозначно. Произвол в фазовом множителе не приводит ни к каким наблюдаемым эффектам и поэтому является физически несущественным. (Здесь мы говорим только о положении микрочастицы в пространстве.)

В соответствии с определением (2.1) можно по известной $\psi$-функции рассчитать вероятность обнаружения частицы в любом конечном объеме $V$. Для этого следует разбить конечный объем на малые элементарные объемы $dV$, найти для них вероятности $dW$ и по теореме о сложении вероятностей несовместимых событий сложить их:

$$W_V=\int\limits_V |\psi|^2 dV. \qquad (2.4)$$

Формула (2.4) вместе с формулой (2.2) лежит в основе реальных измерений вероятности. Однако мы не отметили еще одно необходимое свойство $\psi$-функции. Если провести интегрирование в формуле (2.4) по всему пространству (или по тому объему, в котором нахождение частицы — достоверный факт), то интеграл должен быть равен единице, ибо обнаружение частицы здесь есть событие достоверное; вероятность его равна единице:

$$\int |\psi|^2 dV=1. \qquad (2.5)$$

Равенство (2.5) называется *условием нормировки* функции состояния. Полезно заметить, что в процессе теоретического отыскания $\psi$-функция часто оказывается ненормированной, т. е. интеграл (2.5) равен не единице, а некоторому числу $N$. В таком случае легко находится нормированная функция: $\psi$-функция снабжается необходимым коэффициентом $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Определения (2.1), (2.2), формула (2.4) и условие (2.5) отражают вероятностно-статистический смысл волновой функции. В связи с физическим толкованием возникают ограничения, накладываемые

на $\psi$-функцию: она должна быть однозначной, непрерывной и квадратично-интегрируемой функцией. Последнее требование означает ограниченность интеграла $\int |\psi|^2 dV$, взятого по всему пространству: без этого нельзя добиться выполнения равенства (2.5). По этой же причине на $\psi$-функцию обычно накладывают условие ограниченности: $|\psi| < \infty$. Во многих случаях ограниченность означает, что

$$\lim_{r \to \infty} |\psi| = 0,$$

причем $|\psi|$ достаточно быстро затухает на бесконечности.

Пример 2.1. **Квадратично-интегрируемая функция на конечном промежутке.** Рассмотрим функцию $\psi = C \sin \frac{\pi x}{a}$, заданную на отрезке $(0, a)$ оси $Ox$. Вычисления показывают, что

$$\int_0^a C^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{a}{2} C^2,$$

т. е. это ограниченная величина.

Пример 2.2. **Квадратично-интегрируемая функция на бесконечном промежутке.**

Задана функция $\psi = Ce^{-\frac{r}{a}}$, где $C$ и $a$ — константы, а $r$ — модуль радиус-вектора точки пространства. В этом случае

$$\int_0^\infty Ce^{2-\frac{2r}{a}} dr = \frac{a^3}{4} C^2.$$

Пример 2.3. **Нормировка функций.**
Условие нормировки

$$\int_0^a C^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = 1$$

в примере (2.1) приводит к равенству $C = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Теперь функция

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$$

нормирована на единицу.

Аналогично для примера 2.2 находим

$$C = \frac{2}{a^{3/2}}$$

и

$$\psi = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Пример 2.4. **Использование плотности вероятности для оценки размеров атома.** Зависимость плотности вероятности местоположения электрона от расстояния до ядра в атоме водорода выражается формулой

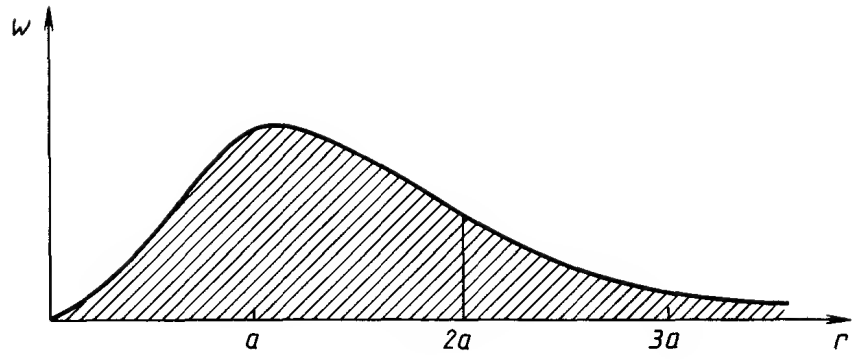



Рис 1.4

$$w(r)=\frac{2}{a^{3/2}}e^{-\frac{2r}{a}}r^2.$$

Ход кривой показан на рисунке 1.4.

Из графика видно, что наибольшая вероятность соответствует расстоянию электрона до ядра: $r=a=0{,}5\cdot10^{-10}$ м. Имеется отличная от нуля вероятность обнаружить электрон и на больших расстояниях. Это значит, что резкой границы у атома нет, но вероятиость обнаружеиия быстро спадает по мере роста $r$ при $r>a$.

Чтобы определить вероятность нахождения электроиа в сфере, ограниченной радиусом $2a$, иеобходимо определить площадь заштрнхованной части графика до точки $r=2a$ и иайтн ее отношение ко всей площади под кривой $w(r)$. Приблизнтельно получается 0,7. Обсудим смысл этой величины.

Для примеиеиия статистики иужно взять много атомов, находящихся в одном н том же состоянин, например $10^6$ атомов. В этом случае наблюдается определенная закономерность: в $0{,}7\cdot10^6$атомов в указаином объеме электроны обнаруживаютси, а в остальных $0{,}3\cdot10^6$ атомов электроны обнаруживаются вне этого объема. В результате отиоснтельиая погрешность предсказаиия тем меньше, чем больше берется атомов. Если же взят один атом или их иебольшое число, то задание вероятиостн не позволяет одиозначно указать, находнтся электрои в задаином объеме или нет.

Существует также наглидная *временна́я* трактовка рассмотренного выше распределения вероятности для одного атома: электрои из какого-нибудь промежутка времени $t$ (достаточно большого по сравнению с некоторым характерным временем — «периодом обращения» вокруг ядра) проводит $0{,}7t$ виутри указанного объема, а $0{,}3t$ — вне его.

Таким образом, размеры атома оцениваются по размерам его *электронного облака* — области пространства с заметио отличной от нуля вероятностью обнаружения электроиа. В ряде случаев оказывается возможным при взаимодействии электронов считать их заряды непрерывно распределениыми по облаку с плотностью:

$$\rho=-ew,$$

где $-e$ — электрический заряд электроиа.

Разобранный пример 2.4 в какой-то мере отражает фактический предел той степени иаглядиости, которая возможна при описании движеиия частицы с помощью волиовой функции. В рамках кваитовой механики, в сущиости, бессмысленно задавать следующие вопросы: в какой точке находится частица, движущаяся с определенной скоростью? По какой траектории происходит ее движение? Чему равио в даиный момент значеиие ее координаты $x$? Природа такова, что на микроскопическом уровие достоверных ответов на такие вопросы получить нельзя. Можио только указать распределенне вероятностей для координат и его измеиение со временем, если плотность вероятиости зависит от времеии.

**2.4. Принцип суперпозиции состояний.** Своеобразие описания состояний и движений микрочастиц с помощью ψ-функции проявляет-

ся в правилах сложения волновых функций, выражающихся принципом суперпозиции состояний.

Принцип суперпозиции в том или ином виде характерен для всех фундаментальных теорий. Так, в классической механике он приводит к векторному сложению ускорений материальной точки, вызванных одновременным действием нескольких независимых сил. В электродинамике имеет место закон векторного сложения напряженности полей, созданных различными источниками. Допустимы и обратные действия разложения сил и напряженностей на составляющие.

Принцип суперпозиции в квантовой механике состоит в следующем: *пусть в данных условиях возможны различные состояния частицы (или системы частиц), описывающиеся волновыми функциями* $\varphi_1$, $\varphi_2$, ..., *тогда возможно и состояние частицы (системы), описываемое ее линейной комбинацией:*

$$\psi = \sum_i C_i \varphi_i, \tag{2.6}$$

где $C_i$ — комплексные числа, удовлетворяющие условию

$$\sum_i |C_i|^2 = 1.$$

Равенство (2.6) допускает и несколько иную физическую интерпретацию, которую мы будем считать второй частью содержания принципа суперпозиции: *пусть в данных условиях частица (система) описывается волновой функцией* $\psi$ *и при этом справедливо равенство (2.6). Тогда частица (система) с вероятностью* $W_i$, *равной* $|C_i|^2$, *находится (может быть обнаружена) в состоянии* $\varphi_i$. Согласно этой формулировке, которая, по существу, является обратным чтением равенства (2.6), состояния $\varphi_i$ при данных условиях образуют альтернативный ряд состояний и частица находится в том или ином из них с определенной вероятностью $W_i$.

Покажем, в каком отношении между собой находятся волновая природа микрочастиц и принцип суперпозиции состояний. Для этого снова обратимся к мысленному опыту и рассмотрим дифракцию частиц на двух отверстиях. Причем опыт произведем следующим образом.

Пусть сначала открыто верхнее отверстие и закрыто нижнее — получается одна дифракционная картина на экране. Затем закроем верхнее отверстие и откроем нижнее — получим другую дифракционную картину. Третья дифракционная картина получается при обоих открытых отверстиях. Если бы речь шла не о микрочастицах, а о движущихся по законам классической механики малых телах — корпускулах, то каждое тело проходило бы через одно отверстие вне зависимости от наличия другого. Поэтому дифракционная картина при обоих открытых отверстиях была бы простым наложением друг на друга картин дифракций, полученных на каждом из отверстий по отдельности.

Однако для микрочастиц опыт обнаруживает дифракцию на двух отверстиях с картиной распределения максимумов и минимумов, от-

личной от простого наложения картин дифракции только от первого отверстия и только от второго. Это новая дифракционная картина.

Результаты опыта в квантовой механике объясняются с помощью принципа суперпозиции. Пусть $\varphi_1$ — функция состояния, соответствующая одному открытому отверстию, а $\varphi_2$ — другому. Плотности вероятности, определяющие дифракционную картину в каждом случае, определяются функциями

$$w_1 = \varphi_1^* \varphi_1, \quad w_2 = \varphi_2^* \varphi_2.$$

При обоих открытых отверстиях функция состояния находится как сумма $\varphi_1$ и $\varphi_2$:

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2.$$

Но теперь ей соответствует новое распределение вероятности:

$$w = \varphi^* \varphi = \varphi_1^* \varphi_1 + \varphi_2^* \varphi_2 + \varphi_1^* \varphi_2 + \varphi_2^* \varphi_1,$$

причем

$$w \neq w_1 + w_2.$$

Именно потому, что складываются волновые функции, а не вероятности, и возникает новая дифракционная картина — результат интерференции волн $\varphi_1$ и $\varphi_2$.

*Сложение волновых функций, а не вероятностей — важнейшая особенность суперпозиции состояний в микромире. Благодаря этому волновая функция является исходным математическим средством описания состояния микрочастиц.*

Видоизменим опыт по наблюдению дифракции электронов на диафрагме с двумя отверстиями. Поставим за каждым из них источник света. Регистрируя фотоны, рассеянные на частицах, мы в принципе можем установить, через какую щель прошел электрон, попавший затем в данную точку экрана.

В результате оказывается, что каждый электрон проходит только через одно отверстие. Но и картина дифракции на экране теперь иная: не та, что была в опыте, где не фиксировалось, через какое отверстие прошел электрон. Теперь дифракционная картина представляет собой простое наложение картин дифракции на каждом отдельном отверстии.

Причина изменения картины состоит в том, что в новых условиях электроны взаимодействуют не только с диафрагмой, но и с детекторами, регистрирующими прохождение щели электронами. (Второй опыт не позволяет ответить на вопрос: через какую щель прошел электрон в условиях первого опыта?)

Обсудим результаты опытов, применяя принцип суперпозиции состояний. В опыте с двумя отверстиями без детекторов альтернативные события — прохождение того или иного отверстия — неразличимы, и вероятность попадания электрона в некоторую точку экрана находится по формуле

$$w_1 = |\varphi_1 + \varphi_2|^2.$$

В опыте с детекторами альтернативы различаются и

$$w_2 = |\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2,$$

так как интерференции волновых функций нет. (Условия для интерференции нарушены столкновениями электронов с фотонами при работе детекторов.)

Приведенные результаты наглядно свидетельствуют, что волновая функция содержит в себе лишь ту информацию, которая соответствует наличному взаимодействию. В опыте с двумя щелями не предусмотрено получение информации о прохождении электроном определенного отверстия, и картина соответствует взаимодействию

с обоими отверстиями. В опыте с детекторами отверстие специально выделяется посредством дополнительного взаимодействия, и картина соответствует взаимодействию с обоими отверстиями в отдельности.

## § 3. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА — ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

**3.1. Вид уравнения и общие свойства его решений.** В классической механике кинематическое уравнение

$$\vec{r}=\vec{r}\,(t)$$

описывает механическое состояние материальной точки в каждый момент времени. В квантовой механике ему следует сопоставить волновую функцию

$$\psi=\psi\,(\vec{r},\ t).$$

Важная задача классической механики — расчет движения материальной точки под действием заданных сил, т. е. нахождение кинематического уравнения. Она решается с помощью основного уравнения классической динамики — уравнения второго закона Ньютона. Аналогичным образом функция состояния (и изменение функции состояния) микрочастицы, движущейся в заданном силовом поле, находится с помощью *основного уравнения квантовой механики — уравнения Шредингера.*

Оставляя в стороне историю его открытия, запишем уравнение Шредингера для рассматриваемого случая сразу в готовом виде:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\,(x,\ y,\ z,\ t)\,\psi. \tag{3.1}$$

Это дифференциальное уравнение в частных производных. В нем $i$ — мнимая единица; $\Delta$ — оператор Лапласа; $m$ — масса частицы; $\psi\,(x,\ y,\ z,\ t)$ — волновая функция; $U\,(x,\ y,\ z,\ t)$ — потенциальная энергия частицы во внешнем силовом поле. Функция $U\,(x,\ y,\ z,\ t)$ берется из классической механики для каждого силового поля.

Конкретные задачи различаются тем или иным видом зависимости потенциальной энергии от координат и времени. При заданной функции $U\,(x,\ y,\ z,\ t)$ ищется общее решение уравнения Шредингера (3.1). Решение содержит некоторые произвольные функции координат и времени. Эти произвольные функции находятся и исключаются из общего решения в конкретных случаях с помощью начальных и граничных условий. Начальное условие

$$\psi\,(x,\ y,\ z,\ 0)=f\,(x,\ y,\ z)$$

определяет вид $\psi$-функции во всех точках пространства в момент времени $t=0$. В свою очередь граничные условия задают значения волновой функции во все моменты времени на границах некоторой области пространства или на бесконечности. Совокупность начальных и граничных условий вместе с условием нормиров-

ки определяет волновую функцию — теперь уже частное решение уравнения Шредингера.

После того как $\psi$-функция найдена, возникает возможность статистически предсказать поведение микрочастицы. Так преломляется в микромире принцип причинности, известный из классической физики: *однозначная динамическая закономерность существует для $\psi$-функции, а через нее определяется статистическая закономерность для микрочастиц.*

Основное уравнение квантовой механики является линейным и однородным дифференциальным уравнением в частных производных. Отсюда следует важное в физическом плане заключение: если функции $\varphi_i$ — некоторые частные решения уравнения, то любая их линейная комбинация тоже возможное решение уравнения. Это положение полностью согласуется с принципом суперпозиции, изложенным в § 2, п. 4. Можно сказать, что принцип суперпозиции есть следствие линейности и однородности уравнения Шредингера. Свойства уравнения (3.1) проявляются также в том, что его решения оказываются определенными с точностью до произвольного постоянного множителя. Эта неоднозначность устраняется с помощью условия нормировки (2.4). (Но решение и после нормировки можно умножить на произвольный постоянный фазовый множитель.)

По причинам, указанным выше, физический смысл имеют только непрерывные, однозначные и квадратично-интегрируемые решения уравнения Шредингера.

**3.2. Стационарные состояния.** Очень важным в теоретическом и практическом отношениях является случай движения частиц в стационарном потенциальном поле, когда потенциальная энергия не зависит от времени: $U = U(x, y, z)$. Если это условие выполняется, то уравнение Шредингера допускает разделение временной и пространственных переменных: уравнение распадается на два независимых уравнения.

Для доказательства последнего утверждения сделаем подстановку

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) f(t)$$

в уравнении (3.1). Получаем

$$i\hbar\varphi \frac{df}{dt} = f\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\varphi. \tag{3.2}$$

Разделим уравнение (3.2) на произведение $\varphi f$. Оно примет вид

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\varphi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\varphi. \tag{3.3}$$

Левая и правая части равенства (3.3) зависят от разных независимых переменных. Поэтому соотношение (3.3) выполняется тогда и только тогда, когда указанные части равны одной и той же постоянной. Полагаем

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = E, \tag{3.4}$$

$$\frac{1}{\varphi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U\right)\varphi=E. \tag{3.5}$$

Теперь исходное уравнение распалось на два независимых уравнения для временно́й и координатной частей волновой функции. Уравнение (3.4) легко решается. Его общее решение имеет вид

$$f=Ce^{-i\omega t},\ \omega=\frac{E}{\hbar}. \tag{3.6}$$

Обратим внимание на то обстоятельство, что зависимость от времени для функции состояния частицы, находящейся в стационарном потенциальном поле, всегда одна и та же: функция $f$ не зависит от вида поля.

Уравнение (3.5) называется *стационарным уравнением Шредингера* или *уравнением Шредингера без времени*. Его обычно записывают в виде

$$\Delta\varphi+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x,\ y,\ z)]\varphi=0. \tag{3.7}$$

При такой записи отчетливо видно, что параметр разделения переменных $E$ имеет размерность энергии. Его отождествляют с полной механической энергией частицы. (Доказательство этого положения будет дано позднее.) В постоянном поле энергия является сохраняющейся во времени величиной: $E$ — константа и не зависит от времени.

Состояния частицы с *определенной* энергией называются *стационарными*. Они описываются волновыми функциями вида

$$\psi(x,\ y,\ z,\ t)=\varphi(x,\ y,\ z)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{3.8}$$

В таких состояниях плотность вероятности для положения частицы оказывается постоянной, не изменяющейся со временем: $w=|\psi|^2=|\varphi|^2$.

Пример 3.1. **Стационарное кулоновское поле.**

Рассмотрим электрон в поле ядра атома водорода. Потенциальная энергия электростатического взаимодействия электрона с ядром выражается формулой

$$U(x,\ y,\ z)=-\frac{\varkappa e^2}{r},$$

где $r$ — расстояние от электрона до ядра. Это стационарное поле: в нем возможны состояния с определенной энергией. Так уравнение Шредингера приводит к следствию, совпадающему с постулатом Бора о стационарных состояниях.

Полезно заметить, что в нестационарных состояниях определенного значения энергия не имеет.

**3.3. Плотность потока вероятности.** Движению микрочастицы соответствует перераспределение плотности вероятности $|\psi|^2$ в пространстве. Вероятность как бы перетекает из одних мест в другие. Движение частиц в пространстве характеризуется с помощью специальной величины — плотности потока вероятности, которую можно найти, опираясь на основное уравнение квантовой механики.

Определим, как изменяется величина $w=|\psi|^2$ с течением времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{3.9}$$

Из уравнения Шредингера следует выражение для производной:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\Delta\psi-\frac{i}{\hbar}U\psi.$$

Выполняя операцию комплексного сопряжения, имеем

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{i\hbar}{2m}\Delta\psi^*+\frac{i}{\hbar}U\psi^*.$$

Подстановка производных $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ и $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$ в формулу (3.9) приводит к выражению

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*). \tag{3.10}$$

Легко проверить, что справедливо тождество

$$\nabla(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)=\psi\Delta\psi^*-\psi^*\Delta\psi.$$

Поэтому формула (3.10) может быть представлена в виде

$$\frac{\partial w}{\partial t}=-\operatorname{div}\vec{j}, \tag{3.11}$$

где

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \tag{3.12}$$

Эта величина и есть вектор плотности потока вероятности, так как выражение (3.11) совпадает по форме с законом непрерывности тока (см. ч. III, (1.6)).

Смысл названия становится ясным, если проинтегрировать уравнение (3.11) по некоторому объему $V$ и применить теорему Гаусса. С одной стороны,

$$\int\limits_V\frac{\partial w}{\partial t}dV=\frac{d}{dt}\int\limits_V|\psi|^2\,dV=\frac{dW_V}{dt},$$

а с другой —

$$\int\limits_V\operatorname{div}\vec{j}\,dV=\oint\limits_S\vec{j}\,d\vec{S}.$$

Получаем равенство

$$\frac{dW_V}{dt}=-\oint\limits_S\vec{j}\,d\vec{S}. \tag{3.13}$$

Отсюда следует, что убыль вероятности нахождения частицы в объеме $V$ равна потоку вектора $\vec{j}$ через поверхность, ограничивающую объем.

В физике уравнения типа (3.11) выражают закон сохранения

какой-нибудь величины. В данном случае речь идет о вероятности. В силу условия нормировки количество вероятности во всем пространстве сохраняется, вероятность лишь может перераспределяться между отдельными областями.

**3.4. Закон сохранения числа частиц.** Сохранение вероятности можно трактовать как сохранение числа частиц. В наиболее наглядной форме этот закон выступает, если допустить наличие в пространстве $N$ независимых друг от друга одинаковых микрочастиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии.

Все частицы описываются одной и той же волновой функцией. Если $N \gg 1$, то величина

$$N\,|\psi|^2$$

равна плотности частиц в каждой точке пространства; интеграл

$$N \int\limits_V |\psi|^2\, dV$$

определяет число частиц в объеме $V$; производная

$$\frac{d}{dt}\left(N \int\limits_V |\psi|^2\, dV\right)$$

описывает изменение числа частиц в указанном объеме за единицу времени. Интеграл

$$N \oint\limits_S j\, d\vec{S}$$

равен потоку частиц через поверхность, ограничивающую объем, а вектор $N\vec{j}$ есть плотность потока частиц. Поэтому равенство

$$\frac{d}{dt}\left(N \int\limits_V |\psi|^2\, dV\right) = -N \oint\limits_S \vec{j}\, d\vec{S}, \tag{3.14}$$

следующее из соотношения (3.13), выражает закон сохранения числа частиц в процессах, описываемых уравнением Шредингера: *частицы не исчезают и не появляются в любой области пространства, они лишь могут входить в заданную область и выходить из нее.*

Произведение $NjdS$ есть число частиц, проходящих в единицу времени через площадку $dS$, поставленную перпендикулярно потоку. Отношение $\frac{NjdS}{NdS}$ определяет вероятность прохождения частицей единичной по размерам площадки, поставленной перпендикулярно потоку (за единицу времени). Мы видим, что указанная вероятность равна модулю вектора плотности потока вероятности. Таким образом, этот вектор может содержать непосредственную информацию о движении частицы.

В заключение данного пункта укажем полезное соотношение. Любая комплексная функция может быть записана в виде (2.3):

$$\psi = Re^{i\alpha},$$

где $R$ и $\alpha$ — действительные функции от координат и времени.

Мы предоставляем читателю возможность доказать, что функции состояния (2.3) соответствует вектор плотности потока вероятности:

$$\vec{j} = \frac{\hbar R^2}{m} \operatorname{grad} \alpha. \tag{3.15}$$

Формула (3.15) будет неоднократно использована в дальнейшем.

**3.5. Волновая функция свободного движения частицы.** Решим уравнение Шредингера для свободной частицы. В микромире частицу считают свободной, если внешние воздействия отсутствуют, т. е. $U(x, y, z, t) = 0$. Это тоже одно из стационарных полей, следовательно, энергия частицы сохраняется. Можно сразу перейти к уравнению Шредингера без времени. Для свободной частицы оно имеет вид

$$\Delta\varphi + k^2\varphi = 0, \tag{3.16}$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Положим

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_1(x)\,\varphi_2(y)\,\varphi_3(z).$$

После подстановки имеем

$$\varphi_2\varphi_3\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \varphi_1\varphi_3\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \varphi_1\varphi_2\frac{d^2\varphi_3}{dz^2} + k^2\varphi_1\varphi_2\varphi_3 = 0. \tag{3.17}$$

Чтобы разделить переменные, делим уравнение (3.17) на произведение $\varphi_1\varphi_2\varphi_3$. Получаем

$$\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + \frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \frac{1}{\varphi_3}\frac{d^2\varphi_3}{dz^2} + k^2 = 0. \tag{3.18}$$

Поскольку функции $\varphi_1$, $\varphi_2$ и $\varphi_3$ зависят от разных переменных, равенство (3.18) выполняется только при условии, что все слагаемые постоянны. Примем

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} &= -k_x^2,\\
\frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} &= -k_y^2,\\
\frac{1}{\varphi_3}\frac{d^2\varphi_3}{dz^2} &= -k_z^2,
\end{aligned} \tag{3.19}$$

причем

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2. \tag{3.20}$$

Все три уравнения (3.19) однотипны. Поэтому достаточно решить одно из них. Выпишем уравнение для функции $\varphi_1$:

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + k_x^2\varphi_1 = 0.$$

Оно имеет два линейно независимых частных решения: $C_1e^{ik_xx}$ и

$C_2 e^{-ik_x x}$. Отсюда видно, что исходное уравнение (3.16) допускает частные решения вида

$$\varphi = Ce^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = Ce^{i\vec{k}\vec{r}}.$$

Здесь $\vec{k}$ — постоянный вектор.

Введем другую сохраняющуюся величину — вектор импульса $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. В таком случае решение

$$\varphi(x, y, z) = Ce^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tag{3.21}$$

описывает частицу с импульсом $\vec{p}$ и энергией $E$. Связь энергии и импульса дается формулой (3.16). Как и в классической механике, $E = \frac{p^2}{2m}$.

Если учесть временно́й множитель (3.6), то получим полную функцию состояния:

$$\varphi(x, y, z, t) = Ce^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = Ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}. \tag{3.22}$$

Это плоская монохроматическая волна, которая совпадает с волной де Бройля (1.15). Такое совпадение, конечно, не случайно, поскольку при разработке квантовой механики с самого начала использовалась гипотеза де Бройля.

Плотность вероятности для координат частицы при свободном движении равна: $w = |C|^2$, т. е. имеется равная вероятность обнаружить частицу в любой точке пространства.

Особенность волиовой фуикции (3.22): для нее не выполняется условие нормировки (2.5). В данном случае

$$\int |\psi|^3 \, dV = \infty.$$

Физически это может быть вызвано тем, что абсолютио свободных частиц не существует в природе. Поэтому понятие о свободном движении — иекоторая идеализация реального положеиия дел, допустимая потому, что всегда возможны состояния, весьма близкие к свободному.

В прииципе мы могли бы запнсать функции состояния для «почти свободиого движения» и пользоваться только ими. Однако математически проще применеиие функцнй (3.22). Разработаны такие способы их использования в кваитовой механике, которые позволяют избежать ошибок и обойти возиикающие математические трудности. В частности, применяются специальные условия нормировки. Одии из возможных методов описаи ниже, другой указан в формуле (7.2).

Пример 3.2. **Вычисление плотности потока вероятности.**

Вычислим с помощью формул (3.22) и (3.15) плотность потока вероятности для свободной частицы:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m}|C|^2 \operatorname{grad}(\vec{k}\vec{r}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m}|C|^2 = \frac{\vec{p}}{m}|C|^2. \tag{3.23}$$

Постояиную $C$ подберем так, чтобы значение $\vec{j}$ было равно числу частиц, пересекающих за единицу времени единичную площадку, перпеидикуляриую вектору $\vec{k}$. Плотность потока равна $n\vec{v}$, где $\vec{v}$ — скорость, а $n$ — концентрация частиц. Полагая $\vec{j} = n\vec{v}$, имеем $|C|^2 = n$.

## § 4. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

**4.1. Состояния с неопределенным значением импульса.** Волновая функция (3.21) описывает состояния свободно движущейся

частицы, в которых не имеют определенных значений координаты частицы. Существуют состояния, в которых нет определенных значений других физических величин, например импульса или его отдельных проекций, энергии, момента импульса и т. д. Сейчас речь пойдет об импульсе частицы. К изучению состояний с неопределенным значением импульса проще всего подойти на основе принципа суперпозиции.

Волновая функция $\varphi = Ce^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$ описывает состояние с заданным значением импульса $\vec{p}$. Для упрощения следующих выкладок направим ось $Ox$ параллельно вектору $\vec{p}$. Функция $\varphi = Ce^{\pm\frac{i}{\hbar}px}$ описывает движение с импульсом, направленным по оси $Ox$, при знаке плюс, и с импульсом, направленным против оси $Ox$, при знаке минус в показателе экспоненты.

Волновая функция

$$\psi(x) = C_1 e^{\frac{i}{\hbar}p_1 x} + C_2 e^{\frac{i}{\hbar}p_2 x} \tag{4.1}$$

по принципу суперпозиции состояний также соответствует некоторому реально осуществимому состоянию частицы. Для этого состояния характерно, что изучаемому микрообъекту уже нельзя приписать определенного значения импульса. В соответствии с принципом суперпозиции в состоянии (4.1) при измерении импульса получаются два конкретных значения: $p_1$ и $p_2$. Причем число случаев, когда наблюдается импульс $p_1$, относится к числу случаев, когда наблюдается импульс $p_2$, как $|C_1|^2$ к $|C_2|^2$.

Полученные результаты имеют общий характер, т. е. и другие величины в некоторых состояниях не имеют определенных значений. Далее после изучения математического аппарата квантовой механики будет видно, что существуют методы, которые позволяют предсказать, какие значения некоторой физической величины и с какой вероятностью наблюдаются на опыте при заданном состоянии микрочастицы.

Большие трудности возникают в связи с попытками дать наглядное физическое толкование функциям типа (4.1). Если представить частицу в виде корпускулы, то непонятно, как может она двигаться в одном состоянии с импульсом $p_1$ и с импульсом $p_2$. И волновые представления тоже не сразу проясняют ситуацию: материальное волновое поле всегда имеет вполне определенный суммарный импульс. Наглядное толкование возможно, если в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией (4.1), находится много частиц. Тогда два слагаемых в выражении (4.1) сопоставляются двум разным потокам частиц.

Нужно привыкнуть к тому, что квантовым объектам нельзя в общем случае сопоставить наглядные представления. Причина, как уже говорилось, в следующем: любые наглядные образы имеют макроскопический классический характер. Их применение в микромире ограничено. И если мы хотим их использовать, то необходимо знать границы применимости классических представлений.

**4.2. Волновой пакет.** Мы видели, что с помощью функции состояния для частицы во всех случаях нельзя указать однозначно ее положение в пространстве. Пример со свободной частицей показывает, что при определенном импульсе координата частицы может

быть вообще любой. Поставим сейчас задачу по отысканию волновой функции такого состояния частицы, в котором и координата, и импульс ее находились бы в возможно более узких интервалах — иными словами, приближались бы к некоторым определенным значениям. Для этого найдем такую функцию состояния, которая была бы отлична от нуля в малой области пространства. Для простоты будем рассматривать состояния частицы, движущейся вдоль оси $Ox$. Искомую функцию можно получить, составив линейную суперпозицию волновых функций (3.22), отвечающих состояниям с определенными импульсами.

Для одномерного движения с импульсом $p$ и энергией $E(p)$ волновая функция имеет вид

$$\psi_p(x,\ t)=C_p e^{\frac{i}{\hbar}[px-E(p)t]}. \tag{4.2}$$

Возьмем набор функций (4.2) с импульсом, изменяющимся непрерывно в интервале от $p_0-\Delta p$ до $p_0+\Delta p$. Их линейная комбинация записывается в виде интеграла:

$$\psi(x,\ t)=\int\limits_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} C(p)e^{\frac{i}{\hbar}[px-E(p)t]}\,dp. \tag{4.3}$$

Такое волновое поле часто называют *группой волн* или *волновым пакетом*.

Исследуем вид функции состояния (4.3), для чего произведем приближенное вычисление интеграла в формуле (4.3). Если интервал $\Delta p$ достаточно мал, то можно считать

$$C(p)\approx C(p_0)=C_0 \tag{4.4}$$

и

$$E(p)\approx E(p_0)+\left(\frac{dE}{dp}\right)_0(p-p_0)=E_0+v_0\eta, \tag{4.5}$$

где

$$\eta=p-p_0,\ v_0=\left(\frac{dE}{dp}\right)_0,\ E_0=E(p_0). \tag{4.6}$$

После подстановки выражений (4.4) ... (4.6) в соотношение (4.3) получаем

$$\psi(x,\ t)\approx C_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x-E_0t)}\int\limits_{-\Delta p}^{\Delta p} e^{\frac{i}{\hbar}(x-v_0t)\eta}\,d\eta.$$

В последней формуле берется интеграл от экспоненты:

$$\int\limits_{-\Delta p}^{\Delta p} e^{\frac{i}{\hbar}(x-v_0t)\eta}\,d\eta=\frac{\hbar}{i(x-v_0t)}\left[e^{\frac{i}{\hbar}(x-v_0t)\Delta p}-e^{-\frac{i}{\hbar}(x-v_0t)\Delta p}\right]=$$

$$=\frac{2\hbar}{x-v_0t}\sin\frac{\Delta p}{\hbar}(x-v_0t).$$

Тогда

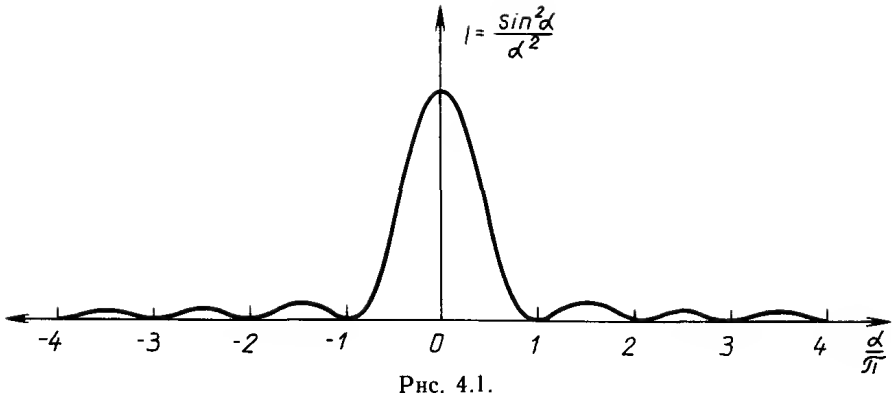



Рис. 4.1.

$$\psi(x,\ t) \approx 2C_0\Delta p \frac{\sin\frac{\Delta p}{\hbar}(x-v_0t)}{\frac{\Delta p}{\hbar}(x-v_0t)} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x-E_0t)}.$$

Нас интересует, где находится частица. Плотность вероятности для координаты $x$ определяется формулой

$$w(x) = |\psi|^2 = 4C_0^2(\Delta p)^2 \frac{\sin^2\alpha}{\alpha^2},$$

где

$$\alpha = \frac{\Delta p}{\hbar}(x-v_0t).$$

График функции $I = \frac{\sin^2\alpha}{\alpha^2}$ дан на рисунке 4.1. Эта функция заметно отличается от нуля лишь в интервале от $-\pi$ до $\pi$. Вне указанного отрезка ее значения могут быть приравнены нулю. Поэтому частица с подавляющей вероятностью обнаруживается на участке оси $Ox$ между точками $x_1$ и $x_2$. Границы участка находятся из равенств

$$\pi = (x_2 - v_0t)\frac{\Delta p}{\hbar},\quad -\pi = (x_1 - v_0t)\frac{\Delta p}{\hbar}.$$

Отсюда определяется длина участка:

$$\Delta x = x_2 - x_1 = \frac{2\pi\hbar}{\Delta p}. \tag{4.7}$$

Итак, волновой пакет вследствие интерференции отдельных составляющих группы волн оказывается сосредоточенным в области пространства протяженностью $\Delta x$. Он не стоит на месте. Точке с максимальной интенсивностью волнового поля соответствует значение $\alpha = 0$. Ее координата $x$ изменяется по закону $x = v_0t$. Это означает, что центр пакета равномерно перемещается вдоль оси $Ox$ со скоростью $v_0$. Параметр $v_0$ называется групповой скоростью. Это скорость движения волнового пакета как единого целого. Для

нерелятивистских частиц $E=\frac{p^2}{2m}$ и $v_0=\frac{p_0}{m}$, т. е. совпадает со скоростью движения классической частицы (с импульсом $p_0$).

Сказанное позволяет сделать вывод о допустимости рассмотрения микрочастицы как материальной точки, если координата ее определяется с точностью до $\Delta x$, а импульс — с точностью до $\Delta p$ (но и при таких условиях корпускулярные представления не вполне адекватны действительности — см. § 4, п. 3).

**4.3. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.** Границы пакета можно считать более широкими, нежели это указано в выражении (4.7). Если учесть дополнительные максимумы функции $I(\alpha)$, то для граничных точек имеем неравенства $\alpha_2 \geqslant \pi$, $\alpha_1 \leqslant -\pi$, или

$$\frac{\Delta p}{\hbar}(x_2 - v_0 t) \geqslant \pi, \quad \frac{\Delta p}{\hbar}(x_1 - v_0 t) \leqslant -\pi.$$

Тогда

$$\Delta x \Delta p \geqslant 2\pi\hbar.$$

Если проанализировать трехмерное движение частицы, то получим три неравенства:

$$\left.\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geqslant 2\pi\hbar, \\ \Delta y \Delta p_y &\geqslant 2\pi\hbar, \\ \Delta z \Delta p_z &\geqslant 2\pi\hbar. \end{aligned}\right\} \tag{4.8}$$

Эти выражения носят название *соотношений неопределенностей* для координат и импульса, или *неравенств* Гейзенберга. Впервые неравенства (4.8) были получены Гейзенбергом в 1927 г.; они сыграли исключительно важную роль в интерпретации выводов квантовой механики. (В ней математический аппарат сложился ранее понимания физической сущности явлений.)

Физический смысл соотношений неопределенностей Гейзенберга состоит в том, что эти неравенства указывают пределы применимости классических представлений о микрочастицах как о материальных точках, движущихся по определенной траектории и имеющих в каждый момент времени определенные значения координат, определенные величину и направление вектора импульса (или скорости).

Неравенства (4.8) указывают, что в природе не существует таких состояний микрообъектов, в которых имелись бы одновременно точные значения координат и вектора импульса. Чем точнее задается положение частицы, тем более широкий набор импульсов должен быть в группе монохроматических волн, составляющих ее $\psi$-функцию. Если $\Delta x \to 0$, то $\Delta p_x \to \infty$. Следовательно, исчезают основания для утверждения о том, что импульс частицы определен, ибо он может оказаться любым числом. И наоборот, если точно определен импульс: $\Delta p_x = 0$, т. е. состояние задано одной волной де Бройля: $\psi = C_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - E_0 t)}$, то полностью отсутствует информация о месте нахождения частицы ($\Delta x$ обращается в бесконечность, так как $\Delta p_x$ равно нулю). Имеется равная вероятность обнаружить частицу в любой точке оси $Ox$.

Из проведенного анализа соотношений (4.8) вытекает важное следствие о *принципиальной невозможности* точно указать траекторию движения частицы.

Соотношения неопределенностей дают критерий разграничения классической и квантово-механической областей и в то же время указывают на соответствие и взаимные переходы между ними. Если неопределенности для координат и проекций импульса, вытекающие из неравенств Гейзенберга, меньше погрешностей измерения этих величин, то мы воспринимаем объект как точечный и движущийся по некоторой траектории в пространстве.

Пример 4.1. **Трекн микрочастнц в камере Внльсона.**

Шнриna трека порядка $10^{-4}$ см. Если считать $\Delta x \approx 10^{-4}$ см, то неопределенность для импульса имеет порядок величины $\Delta p_x \approx \frac{2\pi\hbar}{\Delta x} \approx 6 \cdot 10^{-28}$ кг·м/с. Для электрона, движущегося со скоростью, близкой к скорости света, импульс равен: $p = m_x c = 3 \cdot 10^{-22}$ кг·м/с. Поскольку $\Delta p_x \ll p$ импульс можно считать заданным практически точно. Но трек не является траекторией движения микрочастнцы в силу своей размытости.

Пример 4.2. **Соотношеине неопределеиностей в классической областн.**

Для макроскопических тел импульс всегда отиосительио велик вследствие большой массы. Пылинка массой $10^{-5}$ г, двнжущаяся со скоростью 1 см/с, имеет импульс $10^{-10}$ кг·м/с. Допустим, что мы умеем задавать или измерять импульс с точностью до 6 верных значащих цнфр, что в прнницпе возможно. Это значит, что неопределенность импульса $\Delta p \approx 10^{-16}$ кг·м/с. Из неравенств (4.8) следует, что соответствующая неопределенность координаты $\Delta x \approx 6 \cdot 10^{-18}$ м. Ясно, что в этом случае в класснческой области можно не учитывать квантовые особенностн поведения частиц, так как неопределениость координаты $x$ меньше доступной погрешиости ее измерения.

В случае несущественных по сравнеиию со значениями $p$ и $x$ неопределенностей $\Delta p$ и $\Delta x$ можио в правых частях иеравенств (4.8) положнть $\hbar = 0$. Поэтому в классической физике можно говорить о траектории движенння, конечном ускореннн, плавио меняющейся скорости н т. д.

Понятно, что не только макротела, но и микрочастицы могут участвовать в движениях, удовлетворяющих указанному условию (см. пример 4.1). В таком случае к ним применима классическая механика. Но с точки зрения соотношений неопределенностей частица всегда движется не по геометрической линии, а в некоторой трубке, выделенной в пространстве неопределенностями в значениях координат. Внутри трубки точная траектория отсутствует.

Итак, соотношения неопределенностей Гейзенберга указывают предел точности для одновременного измерения координаты и соответствующей ей проекции импульса. За этой границей указание точного положения вместе с заданием точного импульса теряет смысл, так как микрочастица по своей природе обеими точно заданными в одном и том же состоянии характеристиками не обладает. Но соотношения (4.8) формально не запрещают точного задания одной из сопряженных величин: импульса или радиус-вектора (координаты $x$ или проекции импульса $p_x$).

Заметим, что для точного определения положения частицы имеется еще одно ограничение, вытекающее из наличия связи между энергией и импульсом. При $\Delta x \to 0$ $\Delta p_x \to \infty$. Но тогда импульс частицы может принимать сколь угодно большие значения — вместе с им-

пульсом стремится к бесконечности энергия частицы. Для локализации частицы в какой-нибудь точке пространства требуется сообщить ей бесконечно большую энергию. Отсюда понятно, почему для изучения все более мелких деталей в строении материи необходимо строить все более мощные ускорители. Ведь единственным средством исследований в этой области служит все большее сближение частиц при столкновениях. Соответственно растут необходимые для этого энергии.

Сделаем еще одно замечание. Может показаться, что в волновом пакете достигнут необходимый для наглядности синтез корпускулярных и волновых представлений, так что частице можно сопоставить материальное волновое поле, локализованное в малой области пространства. Но это не так. Если учесть высшие члены в разложении (4.5), то окажется, что с течением времени пакет расширяется, захватывая все большую область пространства. Снова подтверждается квантовое положение о том, что волновая функция описывает состояние частицы, определяет вероятность ее обнаружения в различных точках пространства, но не представляет непосредственно сам объект — микрочастицу.

В учебниках, научных и научно-популярных статьях и книгах по физике микромира нередки утверждения о том, что все фундаментальные частицы: электроны, нейтрино, кварки и т. д.— считаются точечными. Использование такой модели здесь оправдано тем, что при взаимодействии друг с другом (особенно при высоких энергиях) микрочастицы ведут себя так, как если бы их заряд и масса были сосредоточены в одной точке. Согласно квантовой механике использование точечной модели для описания поведения электронов и других частиц согласуется с использованием волновых функций (со всеми вытекающими отсюда последствиями в виде соотношения неопределенностей и т. д.) в рамках вероятностно-статистического толкования $\psi$-функции.

**4.4. Соотношения неопределенностей и измерение физических величин.** Изучение микромира привело к переосмыслению значения измерения физических величин. Оказалось, что теорию невозможно построить без учета взаимодействия, в процессе которого получается информация об объекте. Например, теоретическое положение — соотношения неопределенностей — Гейзенберг получил путем анализа процесса измерения координат и импульсов.

Рассмотрим детальнее физическую сущность измерения координат микрочастиц. Для определения места расположения частицы нужно ограничить свободу ее перемещения, включив ее в состав системы с известными размерами и положением в пространстве (например, электрон в атоме). Но при этом будет потеряна информация об импульсе микрочастицы. Можно не прибегать к локализации частицы, а только заставить ее провзаимодействовать с объектом, положение которого известно. Если такой объект — микрочастица с точно заданными координатами, то ее импульс неизвестен. И в этом случае результат взаимодействия не даст однозначной информации об импульсе микрочастицы.

Такая же проблема возникает при измерениях импульса. Для установления значения этой величины необходимо взаимодействие исследуемой частицы с другой, которая находилась в состоянии с определенным импульсом до взаимодействия и перешла в состояние с определенным импульсом после взаимодействия. Такие состояния микрочастиц описываются монохроматическими волнами де Бройля, которые не несут никакой информации о положении частицы, используемой для измерения. Поэтому при измерении импульса нельзя получить сведения о том, где произошло столкновение, т. е. о координатах изучаемой частицы.

Таким образом, наличие волновых свойств у микрочастиц не позволяет провести опыт со взаимодействием частиц так, чтобы получить одновременно информацию о положении частицы и об ее импульсе. Посмотрим, нельзя ли это сделать при помощи макроскопических тел.

Любое измерение физической величины включает в себя некоторое взаимодействие между измерительным прибором и изучаемым объектом. При этом не только исследуемый предмет воздействует на прибор, изменяя его состояние (за счет чего и становится возможным измерение), но и прибор действует на изучаемый объект, также в какой-то мере изменяя его состояние. Если в классической физике действие прибора на объект можно сделать несущественно малым или учесть его, а затем исключить из показаний, то в микромире такой учет оказывается невозможным. Возмущение в состоянии объекта нельзя сделать пренебрежимо малым или учесть его точным расчетом.

Одна из обсуждавшихся при осмыслении квантовой механики многочисленных схем опытов с одновременным измерением координаты и соответствующей проекции импульса представлена на рисунке 4.2. Частица, движущаяся вдоль оси $Ox$, проходит через отверстие в диафрагме и попадает на экран. В классическом случае взаимодействия частицы с диафрагмой нет или оно пренебрежимо мало. Если частица окажется в точке экрана, лежащей против середины отверстия, то можно утверждать, что в момент прохождения щели проекция импульса равна: $p_y=0$. Для этого же момента известна ее координата $y$ с точностью до ширины отверстия $a$. Щель можно сделать сколь угодно узкой. Тогда значения величин $y$ и $p_y$ находятся одновременно и со сколь угодно малой погрешностью.

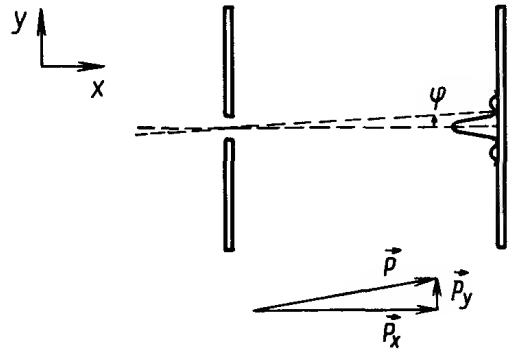



Рис. 4.2.

Для квантового объекта взаимодействием с диафрагмой пренебречь нельзя, так как при узкой щели возникает дифракция волн де Бройля. Опыт не позволяет судить, чем вызвано отклонение частицы на угол $\varphi$: тем, что до прохождения отверстия имелась неравная нулю проекция импульса $p_y$, или тем, что действие прибора на частицу привело к изменению начального импульса, направленного вдоль оси $Ox$. Возникает неопределенность в импульсе, равная $\Delta p_y = p_y = p \sin \varphi$. Если ограничиться углами, лежащими в пределах главного максимума, то можно оценить угол $\varphi$ из условия $a \sin \varphi = \lambda$. (Это соотношение взято из теории дифракции. Оно определяет направление на первый максимум.)

Длина волны де Бройля находится из формулы $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{p_y}$. Поэтому произведение неопределенностей для координаты $y$ и проекции импульса $p_y$ оказывается равным $ap \sin \varphi = 2\pi\hbar$. Очевидно, что оно не равно нулю ни при каких размерах отверстия. При $a \to 0$ возрастает точность в измерении координаты. Но чем уже щель, тем шире главный максимум. Поэтому растет неточность в измерении импульса. При широкой щели дифракцией можно пренебречь: импульс измеряется очень точно, но положение частицы фиксируется грубо.

Небольшое изменение в методе измерений позволило бы находить значение проекции импульса $p_y$ непосредственно. Для этого нужно сделать диафрагму подвижной. Если при прохождении отверстия частица получает добавочный импульс: $\Delta p = p_y$, то диафрагма со щелью придет в движение. Ее импульс станет равным $p_y$. Установка такого типа позволяет осуществить более точное измерение импульса по движению диафрагмы, но положение частицы на оси $Oy$ в ней будет находиться грубее, чем при начальной схеме опыта. Расчет показывает, что и в этом случае мы не выходим за пределы соотношения неопределенностей.

Обратим также внимание на другие важные моменты процесса измерения. Движение частицы после прохождения щели в установке, изображенной на рисунке 4.2, однозначно предсказать нельзя. Расчету поддаются лишь вероятности того или иного направления движения. Частица может полететь в направлении любого максимума. Это означает, что взаимодействие частицы с прибором не является однозначно предсказуемым. Отсюда и возникает невозможность полного учета возмущения, вносимого прибором в начальное состояние частицы. Известно только, что оно конечно (не равно нулю), а по величине таково, что всегда выполняются неравенства Гейзенберга.

Существует два типа измерительных приборов: для измерения координат и для измерения импульсов. Применение приборов одного типа не позволяет получить всю информацию о свойствах микрочастицы, находящейся в некотором состоянии. Только использование установок обоих типов дает возможность получить полную совокупность сведений, которые согласно законам квантовой механики доступны для наблюдателя.

В процессе измерения какой-нибудь характеристики состояние частицы изменяется, и поэтому процесс измерения в микромире, вообще говоря, невоспроизводим. Чтобы выявить на опыте статистические закономерности квантовой механики, необходимо проделать измерения над многими одинаковыми частицами, находящимися в одном и том же начальном состоянии.

Таким образом, анализ показывает, что при измерениях нужно разумно ставить вопросы и не пытаться получить более детальные сведения о движении микрочастиц, нежели это заложено в природе. Так, в опыте с прохождением пучка частиц через диафрагму с двумя отверстиями всякие попытки с помощью детекторов уточнить путь движения частиц и указать, через какое отверстие проходит каждая из них, обречены на неудачу; детекторы вносят настолько сильное возмущение, что изменяется вид дифракционной картины

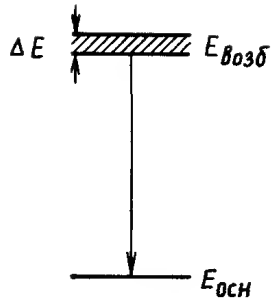



Рис 4.3

и весь характер опыта, так как микрочастица взаимодействует не только с диафрагмой, но и с детектором.

И наконец, есть еще один аспект влияния измерительного прибора на состояние микрочастицы. Можно сказать, что при измерении прибор «выбирает» одно из альтернативных состояний частицы. Пусть состояние микрочастицы описывается волновой функцией $\psi$, которую можно представить в виде линейной суперпозиции волновых функций: $\psi=\sum_i C_i\varphi_i$, где $\varphi_i$ — функция состояния с определенным значением $a_i$ какого-то параметра $a$ (импульса, энергии и др.). При каждом отдельном измерении этой физической величины мы будем получать не смесь всех возможных значений, а одно конкретное значение: $a_1$, или $a_2$, или $a_3$ и т. д. Следовательно, в процессе опыта частица переходит из состояния $\psi$ в состояние $\varphi_i$. Можно сказать, что при измерении «создается» наблюдаемое значение физической величины.

**4.5. Соотношение неопределенностей для энергии и времени.** Допустим, что частица находится в нестационарном состоянии. В этом случае она не обладает определенной энергией. Волновую функцию объектов можно представить как суперпозицию волновых функций стационарных состояний — состояний с определенной энергией.

В частности, нестационарное состояние можно описать волновым пакетом (4.3), составленным из плоских монохроматических волн де Бройля. Стационарному состоянию соответствует неизменное распределение вероятностей для координат частиц. Перемещение пакета — одно из проявлений нестационарности состояния. Поэтому в качестве «меры нестационарности» можно использовать время пребывания пакета $\Delta t$ на отрезке $\Delta x$ оси $Ox$. (Имеется в виду интервал значений координаты $x$, на котором с подавляющей вероятностью обнаруживается частица.)

Согласно неравенствам (4.8)

$$\Delta x \geqslant \frac{2\pi\hbar}{\Delta p}.$$

Искомая мера нестационарности

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_0}.$$

где $v_0$ — скорость движения центра пакета. Она известна:

$$v_0 = \left(\frac{dE}{dp}\right)_0.$$

Поэтому

$$\Delta t \geqslant \frac{2\pi\hbar}{\left(\frac{dE}{dp}\right)_0 \Delta p} \tag{4.9}$$

Учтем, наконец, что

$$\left(\frac{dE}{dp}\right)_0 \Delta p = \Delta E,$$

где $\Delta E$ — неопределенность в значении энергии частицы. Тогда из выражения (4.9) следует неравенство

$$\Delta E \Delta t \geqslant 2\pi\hbar, \tag{4.10}$$

которое называется *соотношением неопределенностей для энергии и времени.*

Хотя по форме соотношение (4.10) совпадает с неравенствами Гейзенберга (4.8), физический смысл его иной. В формулах (4.8) речь идет о неопределенностях в значениях двух физических величин, измеренных в один и тот же момент времени. Но такое толкование неравенства (4.10) невозможно. Как следует из вывода, $\Delta E$ и $\Delta t$ нельзя понимать как неопределенность в энергии, измеренной в какой-то момент времени, соотнесенную с неопределенностью в значении самого момента времени. Согласно определению $\Delta t$ — это время пребывания частицы в некоторой области пространства, т. е. в некотором состоянии.

Укажем на два возможных применения формулы (4.10). Величина $\Delta t$ может быть принята за среднее время жизни, а $\Delta E$ — за ширину уровня энергии нестабильных систем: радиоактивных ядер, способных к распаду элементарных частиц, атомов и молекул в возбужденных состояниях и т. д. Если они имеют дискретные уровни энергии, то эти уровни не заданы точно. Неопределенность в энергии обусловливает конечную ширину уровня. Известны, например, конечная ширина спектральных линий излучения атомов, неопределенность в энергии продуктов радиоактивного распада и т. д. (рис. 4.3).

Другое применение неравенства (4 10) относится к самому процессу измерения энергии. Как уже говорилось ранее, всякое измерение связано с некоторым воздействием прибора на объект измерения. В момент измерения частица (или система) в результате взаимодействия с прибором находится в нестационарном состоянии. Взаимодействие приводит к неопределенности $\Delta E$ в энергии частицы. Под $\Delta t$ понимается время измерения — время воздействия прибора на частицу. Чтобы уменьшить $\Delta E$, необходимо увеличить $\Delta t$; при этом можно сделать сколь угодно малым возмущение, вносимое в начальное состояние.

Точно заданную энергию могут иметь системы, «живущие» как угодно долго в одном квантовом состоянии. Это стационарные

состояния. Точность, с которой закон сохранения энергии может быть проверен на опыте, зависит от времени наблюдения. Фактически проверка может быть проведена только для стационарных состояний.

В кваитовой теории вводится представлеиие о виртуальиых частицах, которые испускаются и поглощаются реальиыми частицами и являются переиосчиками взаимодействия между ними — кваитами соответствующих полей. Виртуальиая частица возиикает и иемедлеиио исчезает. Оиа существует лишь в течеиие малого промежутка времеии $\Delta t$, которому соответствует иеопределеиность эиергии: $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$, целиком приписываемая самой виртуальиой частице. Непосредствеиное иаблюдеиие таких частиц иевозможио, ио рядом следствий модель взаимодействия через виртуальиые частицы подтверждается и является общеприиятой. В иашем курсе иерелятивистской кваитовой механики поиятие о виртуальиой частице ие используется. Одиако иеустраиимое влияиие измерительиого прибора иа микрочастицу можио поиять, если учесть, что взаимодействие передается виртуальиыми кваитами.

В самых общих чертах особеиность микромира состоит в том, что передаваемый кваит существеиио измеияет состояиие микрочастицы: импульс ее сравиим с импульсом кваита по порядку числового зиачеиия. Кваит поглощается или испускается целиком; поэтому импульс частицы измеияется ие иепрерывио, как это имеет место при действии силы иа макротело, а скачкообразио. Каждое измеиеиие импульса случайио и одиозиачио иепредсказуемо, как иепредсказуемо излучеиие или поглощеиие виртуальиого кваита.

Связь частиц в иекоторой системе осуществляется за счет взаимодействия между частицами; последиее же в силу кваитового характера иеизбежио приводит к иеопределеииости импульса, а зиачит, и координиаты. То же отиосится и к измереиию: чем точиее определяется координиата, тем меиьше область локализации микрочастицы, больше взаимодействие и соответствеио больше иеопределеииость, виосимая измерительиым прибором.

В заключение вопроса о соотношениях неопределенностей (4.8) и (4.10) сделаем последнее важное замечание. Величины $\Delta x$ и $\Delta p_x$ в неравенствах (4.8) имеют смысл интервалов, в которые попадают значения координаты и импульса при повторных многократных измерениях, проводимых над множеством независимых тождественных частиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии. Строго установить границы интервалов нельзя: они всегда условны.

Выпадение того или иного значения физической величины — это событие случайное. В теории вероятностей разброс значений случайной величины обычно характеризуют среднеквадратичным отклонением. По определению

$$\delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}},\ \delta p_x = \sqrt{\overline{(p_x-\bar{p}_x)^2}},$$

где чертой обозначены средние значения. В квантовой механике выводится формула

$$\delta x \delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2},$$

представляющая собой иную форму записи неравенств (4.8). Вывод разобран в задаче 22 к главе III. Соответственно неравенство (4.10) нужно заменить соотношением

$$\Delta E \Delta t \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

(имеется в виду, что $\Delta E = \delta E$, $\Delta t = \delta t$).

Наконец, если важен только порядок величины неопределенностей $\Delta x$ и $\Delta p_x$, $\Delta E$ и $\Delta t$, то пишут просто

$$\Delta x \Delta p_x \sim \hbar, \quad \Delta E \Delta t \sim \hbar.$$

## Методические указания и рекомендации

**I.** Первая и вторая главы курса являются пропедевтическими. В первой главе вводятся на элементарном уровне квантово-механические понятия и законы, а во второй они применяются к решению простейших задач. Математический аппарат излагается в третьей главе, после чего возникает возможность решения основных задач и систематического изложения курса. Такая структура диктуется трудностями, которые встречают неподготовленные слушатели, если лекции начинаются с изложения абстрактного математического формализма квантовой механики. При принятом построении удается иллюстрировать математический аппарат на разобранных ранее простых задачах.

Однако при желании лектор может изменить порядок изучения курса. Во всяком случае, материал первой главы должен быть знаком студентам по курсу общей физики; их внимание нужно сосредоточить на функции состояния, особенно на ее вероятностно-статистической трактовке, а также на уравнении Шредингера и разделении переменных в нем. Для самостоятельного чтения рекомендуются книги [4, 12, 13, 17, 18] из списка литературы в конце курса, а также можно использовать учебники [2, 3, 8, 10, 21]. По вопросу об измерениях в микромире можно отослать студентов к литературе [2, 9, 17, 18, 19, 21].

**II.** При изучении материала первой главы читателю полезно ответить на вопросы, выполнить следующие упражнения:

— Назовите проблемы, которые не смогла разрешить классическая физика. Укажите теоретические и экспериментальные работы, инициировавшие возникновение квантовой механики.

— Обсудите корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц: почему ни модель «материальная точка», ни модель «плоская волна» неадекватны микрочастице?

— Дайте математическое определение волновой функции и назовите ее свойства. Сформулируйте положения, раскрывающие физический смысл волновой функции. Сформулируйте принцип суперпозиции состояний и примените его к мысленному дифракционному эксперименту.

— Запишите уравнение Шредингера для микрочастицы в потенциальном поле и охарактеризуйте его математические особенности и особенности решений.

— Обсудите особенности стационарного состояния частицы в потенциальном поле.

— Разберитесь в вероятностной трактовке закона сохранения числа частиц.

— Запишите функцию состояния свободной частицы через па-

раметры $E$ и $p$. Сравнивая ее с выражением для плоской волны в параметрах $\omega$ и $k$, получите формулы де Бройля.

— Всесторонне обсудите соотношения неопределенностей для координат и проекций импульса. Проанализируйте связь между классической и квантовой механикой, опираясь на волновой пакет и соотношения неопределенностей.

— Укажите, чем отличается толкование соотношения неопределенности энергия-время от толкования неравенств Гейзенберга (4.8).

**Упражнение I**

**1.** Вспомните связь энергии и импульса релятивистской частицы. Пользуясь формулой Планка для энергии кванта электромагнитного поля, найдите выражение для импульса фотона.

**2.** Рассчитайте импульс фотона видимого света ($\lambda = 5 \cdot 10^{-7}$ м) и сравните его с импульсом молекулы водорода, взятым при комнатной температуре ($v = 1\,700$ м/с).

Ответ $p_м / p_ф = 2\,000$.

**3.** Рассчитайте длину волны де Бройля для электрона, разогнанного разностью потенциалов в 100 В.

Ответ. $\lambda = 10^{-10}$ м.

**4.** Вычислите длину волны де Бройля дробинки массой 1 г при скорости движения 300 м/с.

**5.** С помощью соотношений неопределенностей оцените порядок величины энергии электрона в атоме водорода. (Радиус атома принять равным $5 \cdot 10^{-11}$ м.)

**6.** Оцените порядок величины энергии нуклона в ядре атома ($r \sim 10^{-15}$ м)

**7.** Покажите с помощью соотношений неопределенностей, что электроны не могут входить в состав ядер атомов.

**8.** Найдите спектр волновых чисел $k$ дебройлевских плоских монохроматических волн, суперпозиция которых образует волновую функцию

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_0 x}, & -a \leqslant x \leqslant a, \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

Ответ.

$$\psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} C(k)\, e^{ikx} dk, \quad C(k) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{ikx} dx = 2a \frac{\sin a(k_0 - k)}{a(k_0 - k)}.$$

Отсюда $|k_0 - k| \leqslant \frac{\pi}{a}$.

**9.** Найдите с помощью условия квантования (1.12) уровни энергии гармонического осциллятора. (Так называется частица, движущаяся в поле: $U = \frac{bx^2}{2}$.)

Ответ. $\varepsilon_n = \hbar \omega n$, $\omega = \sqrt{\frac{b}{m}}$.

**10.** С помощью полуклассической теории Бора вычислите энергию ионизации ионов $He^+$ и $Li^{++}$.

Ответ. 54 эВ, 122 эВ.

**11.** Найдите с помощью полуклассической теории Бора уровни энергии и радиусы стационарных орбит электрона в ионе $He^+$, в системе электрон — позитрон (позитроний).

Указание. Воспользуйтесь формулами (1.11) и (1.11а). Массу электрона замените приведенной массой системы.

**12.** Состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией вида

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\, P(\theta)\, e^{im\varphi},$$

где $r$, $\theta$ и $\varphi$ — сферические координаты, а $m$ — квантовое число, принимающее значения 0, $\pm 1$, $\pm 2$, ... Найдите плотность потока вероятности.

Указание. Воспользуйтесь выражением для оператора набла в сферических координатах:

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

и формулами (2.3) и (3.15).

Ответ. $\vec{j} = \frac{\hbar m}{\mu} \frac{|\psi|^2}{r \sin\theta} \vec{e}_\varphi$,

где $\mu$ — масса электрона.

**13.** С помощью условия квантования (1.12) выведите соотношение (1.10).

Указание. Учтите, что при движении частицы в центрально-симметричном поле сохраняется момент импульса. Кроме того, переменные $r$, $\theta$ и $\varphi$ разделяются.

**14.** Покажите, что частоты линий в спектре атомарного водорода, соответствующие переходам между уровнями энергии с $n \gg 1$, близки к классическим: $\omega_k = k\omega_0$, $k = 1, 2, \ldots$

Решение.

Классический электрон излучает на частоте обращения $\omega_0$ и кратных ей частотах. В квантовом случае

$$\omega_k = \frac{R_y}{\hbar} \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+k)^2} \right],$$

где $k = 1, 2, \ldots$ Если $n \gg k$, то

$$\frac{1}{(n+k)^2} \approx \frac{1}{n^2} \left(1 - 2\frac{k}{n}\right)$$

и

$$\omega_k = \frac{2R_y}{\hbar n^3} k$$

Циклическая частота обращения: $\omega_0 = \frac{v}{r}$.

Используя условие квантования $mvr = \hbar n$ и соотношение $r = an^2$, имеем

$$\omega_0 = \frac{2R_y}{\hbar n^3},$$

что и доказывает предположение.

# ГЛАВА II. ПРОСТЕЙШИЕ ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Уравнение Шредингера (3.1) допускает точные решения для некоторых сравнительно простых потенциальных полей. При этом, как правило, рассматриваются весьма идеализированные системы. Тем не менее для овладения основами квантовой механики полезно изучить ряд таких задач, в которых получаются простые аналитические выражения для функций состояния, дающие исчерпывающие сведения о свойствах исследуемой квантовой системы. На основе таких задач в данной главе мы познакомимся и с некоторыми качественно новыми особенностями поведения микрочастиц, отличающими их от классических корпускул. Рассмотренные ниже случаи важны и потому, что часто используются для моделирования реальных объектов; не повторяя объект во всех деталях, модель отражает его существенные черты, имеющие принципиальное значение. Поэтому такие модели широко применяются в теоретических исследованиях и практических расчетах.

## § 5. ЗАДАЧИ НА ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ

**5.1. Финитное и инфинитное движения.** Наиболее просты задачи на движение микрочастиц в постоянных полях. Кроме того, на первых порах мы ограничимся одномерным движением. Если потенциальная энергия зависит только от одной координаты $x$, то изучается зависимость волновой функции только от этой переменной.

Такие задачи решаются с помощью стационарного одномерного уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x)]\psi=0. \tag{5.1}$$

Напомним, что зависимость волновых функций от времени в состояниях с определенной энергией имеет универсальный характер и уже была найдена ранее (см. гл. I, § 3); следовательно, ею можно пользоваться и находить один координатный множитель функции состояния $\psi(x)$.

Физический смысл имеют только однозначные, непрерывные и всюду ограниченные по модулю $\psi$-функции — решения уравнения (5.1). Можно показать, что непрерывна также и первая производная $\frac{d\psi}{dx}$.

Из уравнения Шредингера (5.1) следует, что

$$\int\limits_{x-a}^{x+a}\frac{d^2\psi}{dx^2}\,dx=\frac{2m}{\hbar^2}\int\limits_{x-a}^{x+a}[U(x)-E]\psi dx.$$

Интеграл слева равен: $\frac{d\psi(x+a)}{dx}-\frac{d\psi(x-a)}{dx}$. Теперь очевидно, что $\lim\limits_{a\to 0}\left[\frac{d\psi(x+a)}{dx}-\frac{d\psi(x-a)}{dx}\right]=0$, что и доказывает непрерывность.

В точках, где $U(x)=\infty$, функция состояния принимает нулевое значение.

Это становится очевидным, если уравнение (5.1) записать в виде

$$\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}[U(x)-E]$$

и принять во внимание, что с бесконечной и положительной потенциальной энергией мы встречаемся в случае действия бесконечно больших сил отталкивания. (Вспомним, например, энергию электростатического взаимодействия двух одноименно заряженных точечных тел.) Если частица не может попасть в точку $x_0$, то вероятность обнаружить ее там равна нулю; следовательно, $\psi(x_0)=0$.

Рассмотрим график потенциальной энергии на рисунке 5 1. При $x=0$ $U(0)=\infty$. Поэтому частица с энергией $E$ не может подойти как угодно близко к началу координат Может или не может частица иметь координату $x\to\infty$, зависит от знака полной энергии.

На больших расстояниях от начала координат $U(x)=0$, и уравнение (5.1) принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{5.2}$$

Уравнение (5.2) имеет два линейно независимых решения: $\psi_1=Ce^{-ikx}$ и $\psi_2=Ce^{+ikx}$. Если $E<0$, то физический смысл имеет только решение $\psi_1$, так как $\psi_2$ расходится на бесконечности. Но $\psi_1\to 0$ при $x\to\infty$. Это означает, что частицу можно обнаружить только на конечных расстояниях от начала координат. Такое движение называется *финитным*.

При $E>0$ одному и тому же значению энергии соответствуют

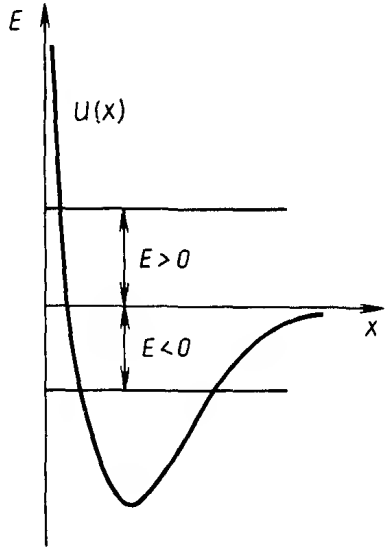



Рис 5.1.

два разных решения: $\psi_1$ и $\psi_2$, описывающие частицы, движущиеся от начала координат в бесконечно удаленные точки и из бесконечности к началу координат. В этом случае движение *инфинитно*, так как есть отличная от нуля вероятность обнаружить частицу сколь угодно далеко от точки $x=0$.

Итак, аналогично классической механике (см. ч. I, § 12) квантовая механика приводит к финитному движению в случае, если полная механическая энергия частицы отрицательна, и к инфинитному, если она положительна.

Обратим внимание и иа то, что волновая функция отлична от нуля в тех точках, где $U(x)>E$. Это озиачает, что микрочастица может быть обнаружена там, где запрещено появляться классическим частицам. Если потенциальная энергия больше полиой механической энергии, то по законам классической механики

$$\frac{mv^2}{2}=E-U(x)<0, \tag{5.3}$$

что невозможио, так как $\frac{mv^2}{2}>0$. С точки зрения квантовой механики это неравенство смысла не имеет, потому что в состояниях с определенной полной энергией ни кинетическая, ни потенциальиая энергии в общем случае не принимают точных значений. Поэтому формулу (5.3) нельзя применять к квантовым объектам непосредственно. Действительно, указывать потенциальную энергию можно только тогда, когда точно задано положение частицы. Кинетическая энергия соответственно имеет определенные значения в состояниях с точно заданным импульсом. Отсюда следует, что в природе не существует состояний, в которых кинетическая и потенциальная энергии имели бы определениые зиачения одновременно.

**5.2. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме.** Потенциальное поле, удерживающее частицу в ограниченной области пространства, можно грубо моделировать потенциальной ямой бесконечной глубины. В одномерном случае полагаем $U(x)=0$ при $0<x<a$ и $U(x)=\infty$ при $x\leqslant 0$, $x\geqslant a$.

Данные условия физически означают, что частица не может покинуть участок оси $Ox$ между точками $O$ и $a$, так как на границах на нее действуют бесконечно большие возвращающие силы. Для выхода за пределы отрезка требуется бесконечная энергия, а кинетическая энергия рассматриваемой частицы в яме конечна. Прямоугольная яма в самых общих чертах описывает системы со связанными состояниями частиц. Молекула газа в объеме какого-то сосуда, электрон в атоме или нуклон в ядре — вот примеры систем, в которых частица не выходит за пределы некоторой области пространства.

Уравнение (5.1) для частицы, движущейся внутри ямы, записывается в следующем виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0, \quad k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E. \tag{5.4}$$

Из условия задачи вытекают граничные условия:

$$\psi(0)=0, \quad \psi(a)=0. \tag{5.5}$$

Общее решение уравнения (5.4) известно:

$$\psi=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}. \tag{5.6}$$

Возьмем в формуле (5.6) $x=0$. Из первого условия (5.5) находим $C_1+C_2=0$. Следовательно, $C_1=-C_2=C$ и

$$\psi=C\sin kx$$

Чтобы удовлетворить второму граничному условию (5.5), нужно считать

$$k=\frac{\pi n}{a},\quad n=1,\ 2,\ \ldots$$

Итак, решение (5.4), удовлетворяющее граничным условиям, найдено: это система функций

$$\psi_n(x)=C_n\sin\frac{\pi n x}{a}, \tag{5.7}$$

описывающих возможные стационарные состояния частицы в яме.

Физический смысл *квантового числа* $n$ заключается в том, что оно определяет набор стационарных состояний и соответствующие им значения энергии частицы. С помощью формулы (5.4) находим

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \tag{5.8}$$

*Энергия оказывается квантованной величиной.* Существенно, что квантование получено в процессе решения уравнения Шредингера с учетом требований, налагаемых на волновую функцию (однозначность, непрерывность, ограниченность), и граничных условий (5.5).

Для окончательного определения вида волновой функции требуется выбрать коэффициент $C_n$ так, чтобы выполнялось условие нормировки:

$$\int_0^a|\psi_n|^2dx=1.$$

После вычисления данного интеграла для функции (5.7) получаем

$$C_n=\sqrt{\frac{2}{a}}. \tag{5.9}$$

Диаграмма распределения плотности вероятности для координаты $x$ в нескольких стационарных состояниях изображена на рисунке 5.2. Если добавить к найденной координатной части функции состояния временной множитель (3.6), то получается стоячая волна с числом узлов, на единицу большим $n$ (считая и узлы на краях ямы). Узлы есть точки, в которых частица никогда не обнаруживается. С ростом квантового числа $n$ число узлов и пучностей возрастает, диаграмма приближается к равномерному распределению вероятностей, характерному для классической частицы.

Действительно, по законам классической механики материальная точка в яме будет двигаться вперед и назад, имея постоянную энергию $E$ и модуль импульса: $p=\sqrt{2mE}$. Вероятность ее обнаружения на участке $dx$ пропорциональна времени

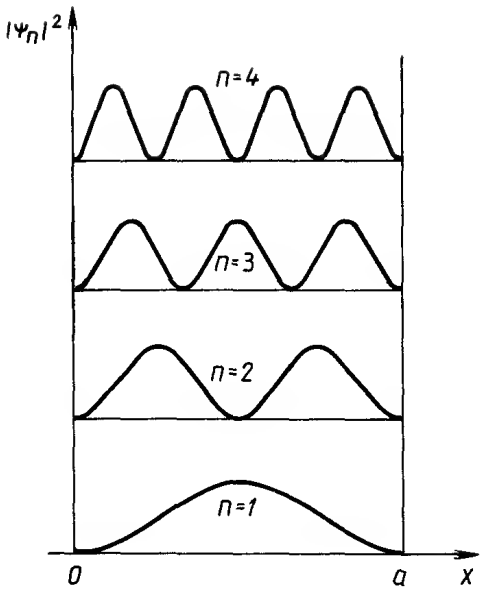



Рис. 5.2.

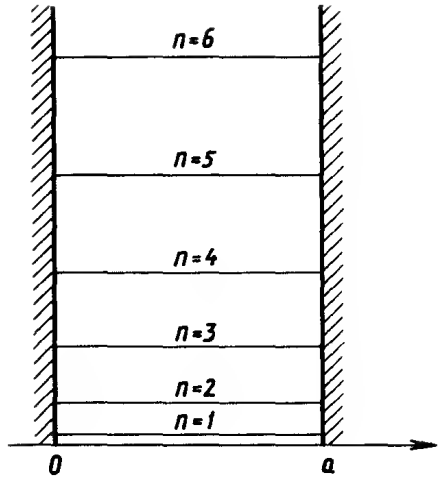



Рис. 5.3.

пребывания $dt$. Так как $dt=\frac{dx}{v}=\sqrt{\frac{m}{2E}}dx$, то $dW=\text{const}\,dx$, т. е. $w=\text{const}$.

Таким образом, из сравнения поведения микрообъекта с макрообъектом в том же силовом поле усматривается общее правило: *по мере роста энергии или квантового числа n движение микрочастицы становится все более близким к классическому.* На рисунке 5.3 изображена энергетическая диаграмма. Обратим внимание на отношение

$$\frac{E_{n+1}-E_n}{E_n}\sim\frac{1}{n}.$$

Оно стремится к нулю при $n\to\infty$, т. е. в пределе получается практически непрерывная последовательность уровней энергии.

Характерно, что самый нижний уровень энергии не равен нулю. Такое положение типично для любой связанной частицы. Согласно соотношениям неопределенностей Гейзенберга неопределенности координаты частицы $\Delta x=a$ соответствует неопределенность импульса $\Delta p=\frac{2\pi\hbar}{a}$, а значит, и энергии $\Delta E=\frac{\Delta p^2}{2m}$. Это минимальное значение энергии частицы, связанной в области с протяженностью $a$, по порядку величины соответствует (5.8). Важно, что чем меньше область пространства, в которой локализуется частица, тем больше ее минимальная энергия.

Дискретность уровней энергии, наличие состояния с неравной нулю минимальной энергией являются общими чертами всех финитных движений.

Сейчас познакомимся с новой характеристикой состояний микро-

частиц. Она выявится, если перенести начало координат в решенной выше задаче в точку $x=\frac{a}{2}$. В новой системе отсчета волновая функция принимает вид

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)=$$

$$=\begin{cases}(-1)^{\frac{n}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n x}{a}, & n=2,\ 4,\ 6,\ \ldots \\ (-1)^{n-1}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi n x}{a}, & n=1,\ 3,\ 5,\ \ldots\end{cases} \qquad (5.10)$$

Функции состояния для четных и нечетных значений квантового числа $n$ по-разному ведут себя при изменении направления оси $Ox$ на противоположное. Состояния с нечетным $n$ описываются четными функциями; состояниям с четным $n$ соответствуют нечетные функции.

В первом случае частице приписывается равное единице значение новой для нас физической величины — *четности*, во втором случае ее значение равно минус единице. Четность есть сохраняющаяся для замкнутой системы частиц величина, не имеющая аналога в макромире. (Подробнее четность обсуждается ниже в § 9 п. 7.)

**5.3. Прямоугольный потенциальный барьер.** Введем понятие о потенциальном барьере. Для этого рассмотрим потенциальную энергию взаимодействия двух протонов, диаграмма которой показана на рисунке 5.4. На расстояниях, больших радиуса действия ядерных сил: $r_0=1{,}7\cdot10^{-13}$ см,— проявляется кулоновское отталкивание (участок диаграммы при $r>r_0$). При $r<r_0$ основную роль играет сильное (ядерное) взаимодействие, обусловливающее притяжение нуклонов (протонов и нейтронов). На расстояниях, меньших $r_k=0{,}3\cdot10^{-13}$ см, притяжение вновь сменяется отталкиванием (но те-

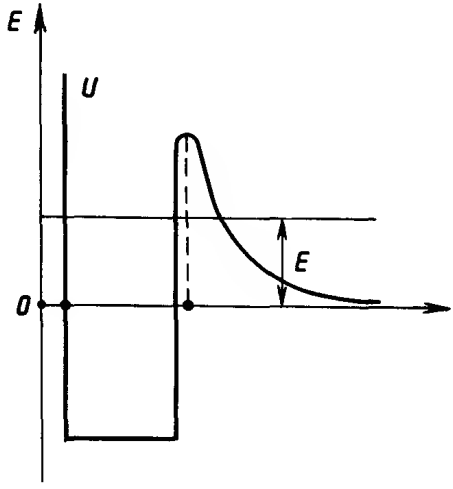



Рис 5.4.

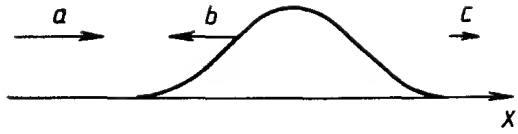



Рис. 5.5. *a* — поток частиц, падающих иа барьер; *b* — поток частиц, отражеииых от барьера; *c* — поток частиц, прошедших барьер.

перь это сильное, а не электромагнитное взаимодействие). Таким образом, диаграмма потенциальной энергии представляет собой потенциальную яму, ограниченную слева прямоугольным потенциальным барьером (ход графика здесь не уточнен, высота порядка 200 МэВ), а справа — барьером высотой порядка 25 МэВ, плавно спадающим при росте $r$.

Если протонам удастся сблизиться до расстояний $r \leqslant r_0$, то происходит реакция ядерного синтеза, нуклоны образуют связанную систему — ядро атома дейтерия. (Связанному состоянию соответствует модель частицы в потенциальной яме.) Но такому сближению частиц препятствует потенциальный барьер. Для выяснения возможности реакции требуется решить задачу о прохождении частиц через барьер при различных энергиях.

Большие энергии частиц достигаются, например, нагреванием вещества до очень высоких температур. Достичь высоких температур нелегко. Еще труднее удержать нагретую плазму. Поэтому большое значение для этой и других аналогичных практических задач на столкновения имеют ответы на такие вопросы: возможно ли прохождение барьера при энергиях ниже вершины барьера? Всегда ли частица пройдет через барьер без отражения, если ее энергия выше пика барьера?

С потенциальными барьерами приходится иметь дело и при исследованиях многих других явлений в атомной физике. К ним относятся столкновения элементарных частиц друг с другом и ядрами, рассеяние пучка электронов на атомах и молекулах, химические реакции и т. д.

Типична следующая постановка задачи о прохождении барьера: на барьер падает поток частиц, движущихся вдоль оси $OX$ (рис. 5.5). Требуется определить, какая часть из них пройдет через барьер и какая отразится от барьера.

В качестве классического аиалога можио рассмотреть поведеиие шарика, иакатывающегося слева иа крутую горку высотой $H$, изображеииую иа рисунке 5.6. Пусть шарик двигался с иачальиой скоростью $v$ и без треиия. Если $\frac{mv^2}{2} < mgH$, то шарик иа горку ие закатится. Подиявшись до уровня $h$, который иаходится из условия $\frac{mv^2}{2} = mgh$, шарик остаиовится и скатится обратио с горки. При $\frac{mv^2}{2} > mgH$ шарик преодолевает горку обязательио, сколько бы раз ии повторялся опыт.

Рис. 5.6.

Решим задачу на потенциальный барьер для микрочастиц. Наиболее простой для расчета случай — прохождение барьера прямоугольной формы. Полный ход потенциальной кривой описывается соотношениями

$$U(x)=\begin{cases}0, & x\leqslant 0,\\ U, & 0<x<a,\\ 0, & x\geqslant a.\end{cases}$$

Им соответствует диаграмма на рисунке 5.7.

Разрывный характер функции $U(x)$ приводит к необходимости записать уравнение Шредингера (5.1) отдельно для всех трех областей, выделенных на рисунке 5.7:

$$\left.\begin{aligned}&\text{I.}\ \frac{d^2\psi_1}{dx^2}+k^2\psi_1=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\\ &\text{II.}\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2}+q^2\psi_2=0, \quad q^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U),\\ &\text{III.}\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2}+k^2\psi_3=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}.\end{aligned}\right\} \tag{5.11}$$

Функции $\psi_1$, $\psi_2$ и $\psi_3$ представляют одно и то же решение в соответствующих интервалах изменения переменной $x$. Чтобы это решение было непрерывным вместе с первой производной, необходимо выполнение граничных условий:

$$\left.\begin{aligned}&\psi_1(0)=\psi_2(0), \quad \psi_2(a)=\psi_3(a),\\ &\psi_1'(0)=\psi_2'(0), \quad \psi_2'(a)=\psi_3'(a).\end{aligned}\right\} \tag{5.12}$$

Запишем общие решения уравнений (5.11):

$$\left.\begin{aligned}&\psi_1=Ae^{ikx}+Be^{-ikx},\\ &\psi_2=Ce^{iqx}+De^{-iqx},\\ &\psi_3=Fe^{ikx}+Ge^{-ikx}.\end{aligned}\right\} \tag{5.13}$$

Постоянные $A$, $B$, $C$, $D$, $F$ и $G$ должны быть такими, чтобы удовлетворялись условия (5.12) и чтобы решение соответствовало постановке задачи.

В областях I и III частицы движутся как свободные. Поэтому легко установить физический смысл отдельных слагаемых в первой и третьей формулах (5.13). Выражение $Ae^{ikx}$ соответствует волне,

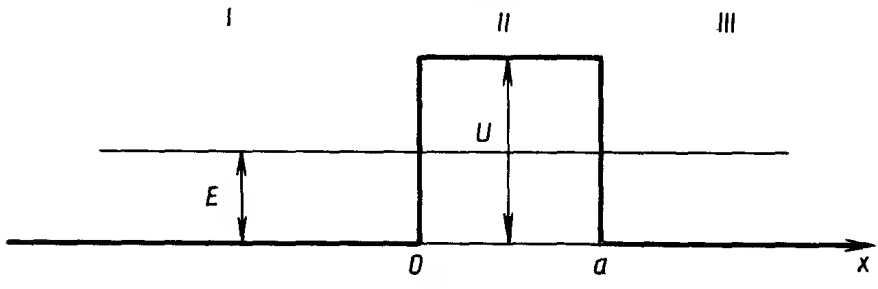



Рис 5.7

распространяющейся вдоль оси $Ox$. (Следует вспомнить о временном множителе $e^{-i\omega t}$.) Это слагаемое описывает частицы, падающие на барьер. Частицы, отраженные от барьера, представлены в решении членом $Be^{-ikx}$. В области III также имеются две волны. Волна $Fe^{ikx}$, бегущая по направлению оси $Ox$, связана с частицами, прошедшими через барьер. Волна, распространяющаяся в обратном направлении, сопоставляется частицам, падающим на барьер справа. По условиям задачи таких частиц нет, поэтому $G=0$.

Чтобы сравнить между собой количество падающих, отраженных и прошедших через барьер частиц, найдем плотность потока вероятности для частиц, падающих на барьер, отраженных от барьера и прошедших через него. Применим формулу (3.23):

$$j_{\text{пад}}=\frac{\hbar k}{m}|A|^2,$$

$$j_{\text{отр}}=\frac{\hbar k}{m}|B|^2,$$

$$j_{\text{прош}}=\frac{\hbar k}{m}|F|^2$$

Обозначим через $P$ и $R$ отношения плотностей потоков:

$$P=\frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}}=\frac{|F|^2}{|A|^2},\quad R=\frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}}=\frac{|B|^2}{|A|^2}.$$

Величина $P$ называется коэффициентом прохождения или прозрачностью барьера, $R$ — коэффициентом отражения.

Вследствие непрерывности волновой функции и ее производной плотность потока вероятности во всех областях должна быть одна и та же. Отсюда следует равенство

$$j_{\text{пад}}=j_{\text{отр}}+j_{\text{прош}},$$

выражающее закон сохранения числа частиц при прохождении барьера. Из него вытекает связь коэффициентов $P$ и $R$: $P+R=1$.

Смысл этой формулы установить нетрудно: величины $P$ и $R$ определяют вероятность прохождения частицей барьера и отражения от барьера, поэтому их сумма должна быть равна единице.

Далее нужно вычислить коэффициенты $A,B,C,D,F$, для чего следует использовать общее решение (5.13) и граничные условия (5.12):

$$\left.\begin{aligned} &A+B=C+D,\\ &Ce^{iqa}+De^{-iqa}=Fe^{iqa},\\ &k(A-B)=q(C-D),\\ &q(Ce^{iqa}-De^{-iqa})=kFe^{ika}. \end{aligned}\right\} \tag{5.14}$$

Перепишем уравнения (5.14) в виде

$$\left.\begin{aligned} &A+B=C+D,\\ &A-B=\frac{q}{k}(C-D),\\ &Ce^{iqa}+De^{-iqa}=Fe^{ika},\\ &Ce^{iqa}-De^{-iqa}=\frac{k}{q}Fe^{ika}. \end{aligned}\right\} \tag{5.15}$$

Из первых двух уравнений этой системы следует

$$2A=\left(1-\frac{q}{k}\right)C+\left(1-\frac{q}{k}\right)D, \tag{5.16}$$

а из третьего и четвертого

$$\begin{aligned} C&=\frac{1}{2}F\mathrm{e}^{ika}e^{-iqa}\left(1+\frac{k}{q}\right),\\ D&=\frac{1}{2}F\mathrm{e}^{ika}e^{iqa}\left(1-\frac{k}{q}\right). \end{aligned} \tag{5.17}$$

Подставляя значения постоянных $C$ и $D$ из соотношений (5.17) в (5.16), получаем

$$2A=\frac{1}{2}F\mathrm{e}^{ika}\left[\left(1+\frac{q}{k}\right)\left(1+\frac{k}{q}\right)e^{-iqa}+\left(1-\frac{q}{k}\right)\left(1-\frac{k}{q}\right)e^{iqa}\right].$$

Отсюда вытекает соотношение

$$\frac{F}{A}=\frac{4kq\mathrm{e}^{-ika}}{(k+q)^2e^{-iqa}-(k-q)^2e^{iqa}}. \tag{5.17'}$$

После вычислений для коэффициентов $F$ и $A$ получаем

$$\frac{F}{A}=\frac{2qk\mathrm{e}^{-ika}}{2qk\cos qa-i(k^2+q^2)\sin qa}. \tag{5.18}$$

Дальнейший разбор задачи произведем сначала для энергий выше пика барьера. При $E>U$ $q$ действительно. Тогда

$$P=\frac{4k^2q}{4q^2k^2\cos^2 qa+(k^2+q^2)^2\sin^2 qa} \tag{5.19}$$

и

$$R=1-P=\frac{(k^2-q^2)^2}{(k^2+q^2)^2+4k^2q^2\operatorname{ctg} qa}. \tag{5.20}$$

Неожиданный с точки зрения классической физики результат: частица имеет неравную нулю вероятность отразиться от барьера, несмотря на то что ее энергия превышает высоту потенциального барьера. Это явление объясняется волновыми свойствами частиц. (Вспомним, что волны отражаются на границе сред с различными плотностями.)

Найдем $P$ при $E<U$. Сейчас $q$ — чисто мнимая величина. Пусть в формуле (5.17') $q=if$, где $f=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}$:

$$\frac{F}{A}=\frac{4ikfe^{-ika}}{(k+if)^2e^{fa}-(k-if)^2e^{-fa}}. \tag{5.21}$$

Вводя гиперболические функции

$$\mathrm{Sh}fa=\frac{1}{2}(e^{fa}-e^{-fa}),\ \mathrm{Ch}fa=\frac{1}{2}(e^{fa}+e^{-fa}),$$

приведем выражение (5.21) к виду

$$\frac{F}{A}=\frac{2ikfe^{-ika}}{(k^2-f^2)\,\mathrm{Sh}fa+2ik\mathrm{Ch}fa},$$

тогда

$$P=\frac{4k^2f^2}{(k^2-f^2)^2\mathrm{Sh}^2fa+4k^2f^2\mathrm{Ch}^2fa}. \qquad (5.22)$$

Замечателен вывод, что при энергии ниже пика барьера частица может пройти сквозь него. Коэффициент прозрачности — сложная функция от энергии частицы, высоты и ширины потенциального барьера.

На практике вместо громоздкой формулы (5.22) для разного рода оценок и приближенных расчетов используют приближенное выражение, которое получается при условии $e^{2fa}\gg 1$. Если данное неравенство справедливо, то

$$\mathrm{Sh}fa\approx\mathrm{Ch}fa\approx\frac{1}{2}e^{fa}$$

и

$$P=\frac{16k^2f^2}{(k^2+f^2)^2}e^{-2fa}.$$

Поэтому окончательный результат записывается в виде соотношения

$$P=P_0e^{-2fa}. \qquad (5.23)$$

Вероятность прохождения барьера обычно мала, и она тем меньше, чем шире и выше барьер и чем больше масса частицы (сравнение производится при одной и той же энергии).

Явление прохождения барьера тесно связано с возможностью появления частицы в запрещенной с точки зрения классической физики области, где $U>E$. Характерно, что частица выходит из пределов потенциального барьера с той же энергией, с которой она в него входит. Поэтому прохождение барьера образно называют туннельным эффектом. Частица не взбирается на вершину барьера (ее энергия везде постоянна) — она как бы проходит под ним через туннель.

Формула (5.23) обобщается на барьер произвольной формы.

Разобьем его на узкие прямоугольные полоски. Вероятность прохождения барьера равна произведению вероятностей прохождения всех элементарных прямоугольных барьеров, для которых высота полоски больше энергии частицы:

$$P=\prod_i P_i=P_0\prod_i e^{-2f_i\Delta x_i},\quad P_0=\prod_i P_{0i},$$

где

$$f_i=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\,[U(x_i)-E]}.$$

В пределе, когда полоски будут бесконечно тонкими и их число неограниченно возрастет, имеем

$$P=P_0e^{-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{U(x)-E}\,dx} \qquad (5.24)$$

Точки $x_1$ и $x_2$ определяются из условия $U(x)=E$.

Туннельный эффект — типично квантовое явление, которое невоз-

можно понять без учета волновых свойств частиц. Он лежит в основе многих физических процессов: здесь распад и деление ядер, протекание ряда химических реакций, эмиссия электронов из металла и многие другие.

## § 6. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

**6.1. Постановка задачи.** Гармонический осциллятор — это материальная точка, совершающая гармонические колебания, т. е. колебания, в которых смещение точки из положения равновесия изменяется по закону синуса и косинуса. Ясно, что такое кинематическое определение непригодно в квантовой области, где нельзя указать точного положения микрочастицы в пространстве. Более общим определением гармонического осциллятора, пригодным и в микромире, является динамическое определение.

Классический осциллятор — это материальная точка, движущаяся в силовом поле, в котором потенциальная энергия имеет минимум, как, например, на рисунке 6.1. В таком случае (см. ч. I, § 26) малые отклонения частицы от точки устойчивого равновесия — минимума — приводят к гармоническим колебаниям. Приближенное значение потенциальной энергии, принимаемое в одномерном случае в расчет, следующее:

$$U=\frac{kx^2}{2}, \tag{6.1}$$

где $k>0$ — коэффициент квазиупругой силы.

Квантовый осциллятор — это частица, движущаяся в потенциальном поле с минимумом энергии. Если полная энергия частицы $E$ — величина малая, то потенциальную энергию можно выразить формулой (6.1). Коэффициент $k$ удобно выразить через циклическую частоту колебаний: $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$. В таком случае вместо (6.1) имеем

$$U=\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Последняя формула и определяет постановку задачи о квантовом гармоническом осцилляторе: это микрочастица, находящаяся в потенциальном поле вида (6.1).

Гармонические колебания играют очень важную роль в классической физике. Не менее важное значение имеет задача о гармоническом осцилляторе и в квантовой физике, где также говорят о гармонических колебаниях. Результаты ее решения средствами квантовой механики интересны как сами по себе, так и в качестве модельных представлений для реальных систем, в которых частица движется в силовом поле в окрестности точки минимума потенциальной энергии.

**6.2. Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора.** Запишем уравнение Шредингера для квантового гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\psi=0. \tag{6.2}$$

Здесь $\omega$ — частота колебаний классического осциллятора. С точки зрения квантовой физики это некоторый параметр.

Начнем решение с замены переменных, что позволит упростить форму исходного уравнения (6.2). Введем безразмерную координату $z$:

$$z=\frac{x}{x_0}, \quad x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{6.3}$$

После подстановки получаем уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dz^2}+(\lambda-z^2)\psi=0, \tag{6.4}$$

где

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{6.5}$$

При $|z|\gg 1$ постоянную $\lambda$ в уравнении (6.4) можно опустить. Тогда

$$\frac{d^2\psi}{dz^2}-z^2\psi=0.$$

Если $\psi=e^{-\frac{z^2}{2}}$, то

$$\frac{d^2\psi}{dz^2}=z^2e^{-\frac{z^2}{2}}\left(1-\frac{1}{z^2}\right).$$

Отсюда видно, что экспонента $e^{-\frac{z^2}{2}}$ описывает асимптотическое решение уравнения (6.4) при $z\to\pm\infty$. Поэтому будем искать функцию состояния осциллятора в виде

$$\psi=e^{-\frac{z^2}{2}}f(z). \tag{6.6}$$

Функция $f(z)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2f}{dz^2}-2z\frac{df}{dz}+(\lambda-1)f=0, \tag{6.7}$$

которое получается из уравнения (6.4) после подстановки функции (6.6).

Далее, используя метод степенных рядов, полагаем

$$f=\sum_{k=0}^{\infty}a_kz^k. \tag{6.8}$$

Подстановкой ряда (6.8) в уравнение (6.7) приходим к тождеству

$$\sum_k k(k-1)a_kz^{k-2}-2z\sum_k ka_kz^{k-1}+(\lambda-1)\sum_k a_kz^k=0. \tag{6.9}$$

Его можно записать в виде одной суммы:

$$\sum_{m=0}^{\infty} b_m z^m = 0. \tag{6.10}$$

Для выполнения последнего равенства при любых $z$ необходимо, чтобы были равны нулю коэффициенты при всех $z^m$. Составим выражение для коэффициента $b_m$. Для этого из первой суммы в равенстве (6.9) выпишем член с $k=m+2$, а из второй и третьей — с $k=m$. Получаем

$$b_m=(m+2)(m+1)\,a_{m+2}-2ma_m+(\lambda-1)\,a_m. \tag{6.11}$$

Приравнивая выражение (6.11) нулю, находим формулу, которой должны удовлетворять коэффициенты ряда (6.8):

$$a_{m+2}=\frac{2m+1-\lambda}{(m+2)(m+1)}\,a_m. \tag{6.12}$$

Формула (6.12) относится к рекуррентным соотношениям; она позволяет повторным применением выразить все коэффициенты $a_m$ через первые два, которые остаются неопределенными. Величины $a_0$ и $a_1$ представляют собой две произвольные постоянные, входящие в общее решение дифференциального уравнения второго порядка (6.4).

Исследование ряда (6.8) показывает, что в общем случае он расходится при $z \to \pm\infty$, причем настолько быстро, что волновая функция (6.6) обращается в бесконечность. Нам же нужны всюду ограниченные решения. Они могут быть получены, если ряд (6.8) оборвать на некотором слагаемом и превратить в полином конечной степени $z$. Тогда экспоненциальный сомножитель обеспечит затухание функции состояния (6.6) на бесконечности. Такие полиномы также будут решениями уравнения (6.7).

Итак, обрываем ряд на члене с индексом $n$: $a_n \neq 0$; все старшие коэффициенты, начиная с $a_{n+2}$, равны нулю; с помощью формулы (6.12) имеем

$$\lambda=2n+1. \tag{6.13}$$

Рекуррентная формула принимает вид

$$a_{m+2}=\frac{2(m-n)}{(m+2)(m+1)}\,a_m. \tag{6.14}$$

Полиномы с коэффициентами (6.14) обозначаются символом $H_n(z)$. В них мы можем еще распорядиться по своему усмотрению коэффициентом при низшей степени $z$. Это будет $a_0$ или $a_1$ (если $n$ четно, то в полиноме содержатся только члены с четными степенями $z$, если $n$ нечетно — с нечетными). Обычно постоянные выбирают так, чтобы коэффициент при высшей степени $z$ был равен $2^n$. Тогда полиномы совпадают с хорошо изученными в математике полиномами Чебышева — Эрмита. Их можно получить с помощью полиномообразующей формулы

$$H_n(z)=(-1)^n e^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}(e^{-z^2}). \tag{6.15}$$

Функции состояния для квантового осциллятора находим:

$$\psi_n=N_n e^{-\frac{z^2}{2}}H_n(z), \quad z=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \tag{6.16}$$

Нормировочный множитель $N_n$ находится из условия

$$\int|\psi_n|^2\,dx=1,$$

отсюда

$$N_n=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}x_0\sqrt{\pi}}. \tag{6.17}$$

Далее с помощью формул (6.15) и (6.17) мы вычислим несколько $\psi_n$.

**6.3. Анализ решения задачи о гармоническом осцилляторе.** Условие (6.13) задает правило квантования энергии осциллятора. Если учесть подстановку (6.5), то

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots \tag{6.18}$$

Это одна из самых фундаментальных формул квантовой физики. Из нее прежде всего следует дискретный набор значений энергии, обычно называемых уровнями. Интервал между соседними уровнями постоянен и равен $\hbar\omega$, поэтому переходы между ними обеспечивают излучение или поглощение одинаковых квантов энергии. Если этим квантам сопоставляется макроскопическое волновое поле, например электромагнитное, то частота его и определяется формулой Планка (1.3). Таким образом, гипотеза Планка оказалась прямым следствием общих принципов квантовой механики.

Далее, наименьшее возможное значение энергии равно $\frac{\hbar\omega}{2}$ — это энергия так называемых нулевых колебаний. Как и в прямоугольной яме, уровни осциллятора начинаются с некоторого отличного от нуля минимального значения.

С энергией нулевых колебаний: $E_0=\frac{\hbar\omega}{2}$ — связан целый ряд физических явлений. В частности, она свидетельствует об отсутствии покоя у частиц вещества при абсолютном нуле температуры. На ее основе сложилось представление о нулевых колебаниях вакуума как об основном (невозбужденном) состоянии электромагнитного поля и т. д.

Рассмотрим несколько функций состояния квантового осциллятора, соответствующих энергиям $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$, $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$, $E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$ и т. д. С помощью формул (6.15) ... (6.17), а также возвращаясь к исходной переменной $x$ на основе соотношения (6.3), получаем

$$\psi_0(x)=\frac{1}{\pi^{1/4}x_0^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}},$$

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\pi^{1/4}(2x_0)^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\frac{2x}{x_0}, \qquad (6.19)$$

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\pi^{1/4}(8x_0)^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\left(4\frac{x^2}{x_0^2}-2\right).$$

На рисунке 6.2 показаны соответствующие диаграммы плотности вероятности. Вертикальные линии проведены через точки, соответствующие амплитудным значениям координат классического осциллятора с рассматриваемыми энергиями $E_0$, $E_1$, $E_2$. Штриховые кривые изображают классическую плотность вероятности как отношение времени нахождения материальной точки в данном месте пространства к периоду колебаний. Из формул (6.19) также видно, что четность состояния определяется четностью квантового числа $n$: при четных $n$ четность равна $+1$, а при нечетных $-1$.

Уместно изобразить еще уровни энергии осциллятора на диаграмме его потенциальной энергии (рис. 6.3) Если сравнить эту диаграмму с диаграммой рисунка 5.3 для потенциальной ямы, то становится очевидной зависимость расстояний между уровнями от формы потенциальной кривой.

* * *

На примере разобранных одномерных задач можно указать на некоторые общие особенности квантово-механического движения.

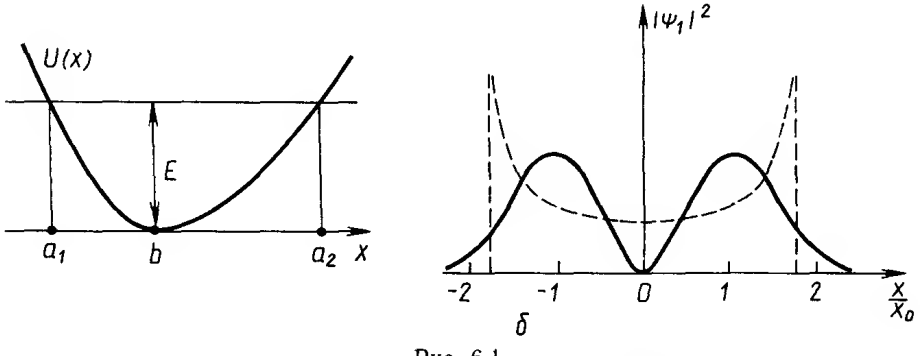



Рис. 6.1.

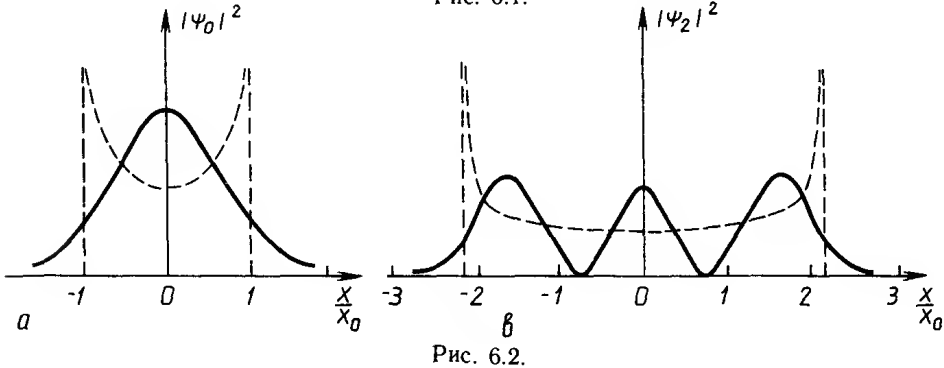



Рис. 6.2.

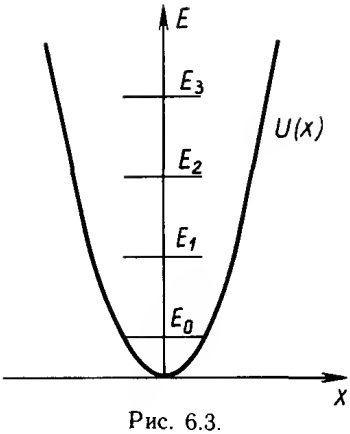



Рис. 6.3.

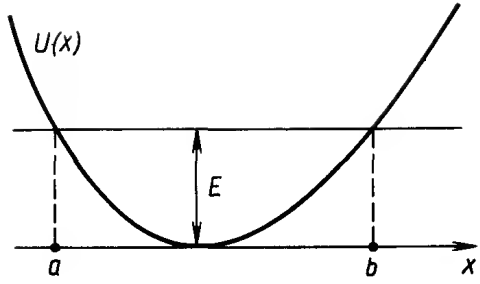



Рис. 6.4.

1. В постоянных полях типа потенциальной ямы возможны стационарные состояния с дискретными уровнями энергии.

2. У таких систем наименьшее значение энергии отлично от нуля, что соответствует невозможности абсолютного покоя и локализации частиц в точке пространства.

3. Квантование энергии характерно для связанных состояний. Для несвязанных частиц движение инфинитно, и энергия принимает непрерывный ряд значений.

4. Как координата, так и импульс в связанных состояниях неопределенны, а это значит, что подразделить энергию на кинетическую и потенциальную невозможно.

5. Квантовые частицы способны проникать в области пространства, недоступные для классических частиц.

**6.4. Квазиклассическое приближение.** Уравнение Шредингера допускает аналитические решения в сравнительно небольшом числе задач на движение частицы в конкретном поле. В теории развито несколько методов приближенного решения уравнения Шредингера. При изучении одномерного движения в квантовой механике широкое применение получило так называемое квазиклассическое приближение, или метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (ВКБ). Мы познакомимся с его содержанием. (Другой приближенный метод — теория возмущений — изложен в главе V.)

Запишем одномерное уравнение Шредингера (5.1), обозначая штрихами производные по координате $x$:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0.$$

Будем искать решение в виде

$$\psi = Ce^{\frac{i}{\hbar}S(x)}, \tag{6.20}$$

где $C$ — постоянная величина, а $S(x)$ — неизвестная функция, имеющая размерность действия. Подставляя выражение (6.20) в урав-

нение Шредингера, получим новое уравнение для этой вспомогательной функции:

$$(S')^2 = 2m\,(E - U\,(x)) + i\hbar S''. \qquad (6.20a)$$

Пользуясь формулой для модуля классического импульса

$$p = \sqrt{2m\,(E - U\,(x))},$$

вместо уравнения (6.20а) имеем

$$(S')^2 = p^2 + i\hbar S''. \qquad (6.21)$$

Пока что никаких допущений о замене точных выражений на приближенные не делалось, поэтому уравнение (6.21) эквивалентно исходному уравнению.

Далее представим искомую функцию $S\,(x)$ в виде ряда

$$S\,(x) = S_0\,(x) + \hbar S_1\,(x) + \hbar^2 S_2\,(x) + \ldots, \qquad (6.22)$$

где $S_0\,(x)$, $S_1\,(x)$, $S_2\,(x)$, .. — неизвестные функции, которые следует определить. Постоянную Планка $\hbar$ считаем малым параметром, по которому выполнено разложение, т. е. второе слагаемое в разложении (6.22) имеет первый порядок малости, третье — второй и т. д.

В классическом случае можно считать $\hbar = 0$, в чисто квантовом $\hbar$ имеет тот же порядок, что и величина рассматриваемого в задачах действия $S$. В промежуточном случае $\hbar$ за нуль принимать нельзя, но малой величиной считать можно. Отсюда и название — квазиклассическое приближение.

Подставим разложение (6.22) в уравнение (6.21):

$$(S_0')^2 + 2\hbar S_0' S_1' + \hbar^2 (S_1')^2 + 2\hbar^2 S_0' S_2' + \ldots = p^2 + i\hbar S_0'' + i\hbar^2 S_1'' + \ldots$$

Приравнивая члены одинакового порядка малости в левой и правой частях этого равенства, получаем систему дифференциальных уравнений для нахождения $S_k\,(x)$:

$$(S_0')^2 = p^2,\ 2S_0' S_1' = iS_0'',\ \ (S_1')^2 + 2S_0' S_2' = iS_1'',\ \ldots,$$

или

$$S_0' = \pm p,\quad S_1' = \frac{i}{2}\frac{S_0''}{S_0'} = \frac{i}{2}\frac{p'}{p},\ \ldots \qquad (6.23)$$

Решая последовательно уравнения системы (6.23), находим искомые функции $S_k\,(x)$:

$$S_0 = \pm \int_{x_0}^{x} p\,(x)\,dx, \qquad (6.24)$$

где $x_0$ — произвольная постоянная интегрирования,

$$S_1 = \frac{i}{2} \ln p\,(x) \quad \text{и т. д.} \qquad (6.25)$$

Ограничимся первым (по степени $\hbar$) приближением. Оборванный на втором члене ряд (6.22) с помощью выражений (6.24) и (6.25) дает

$$S(x)=\pm\int_{x_0}^{x} p(x)\,dx+i\frac{\hbar}{2}\ln p(x),$$

а формула (6.20) — искомое приближенное решение уравнения Шредингера:

$$\psi=Ce^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x)\,dx}e^{-\frac{1}{2}\ln p(x)},$$

или

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x)\,dx}.$$

Найдено два частных решения. Из них можно построить общее:

$$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x)\,dx}+\frac{C_2}{\sqrt{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x)\,dx}. \qquad (6.26)$$

Границы применимости квазиклассического приближения определяются из уравнения (6.21). Необходимо, чтобы

$$\hbar\frac{|S''|}{(S')^2}\ll 1.$$

Это эквивалентно неравенству

$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{S'}\right)\right|\ll 1.$$

Полагая $S'=p$, имеем

$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{p}\right)\right|\ll 1.$$

Находим производную от $p(x)$:

$$\frac{dp(x)}{dx}=\frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-U(x))}=-\frac{m}{p}\frac{dU}{dx}=\frac{m}{p}F,$$

где $F$ — классическая сила, действующая на частицу. В итоге условие применимости метода сводится к неравенству

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3}\ll 1,$$

из которого видно, что импульс частицы не должен быть слишком малым.

Пример 6.1. **Применение метода ВКБ к свободной частице.**

Для частицы, движущейся в отсутствие сил, $U(x)=0$ и $p=p_x$ — постоянные величины. Поэтому выражение (6.26) приводит к волновой функции

$$\varphi=A_1e^{\frac{i}{\hbar}p_xx}+A_2e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx}.$$

Это две плоские волны, движущиеся по оси $Ox$ навстречу друг другу, уже известные нам по точному решению задачи (3.21). Таким образом, в данном случае метод ВКБ дает точное решение.

Значительный практический интерес представляют задачи на финитное движение частиц. В этом случае силовое поле задается

некоторой потенциальной ямой (рис. 6.4). Здесь точки $a$ и $b$ называются поворотными; в них полная энергия равна потенциальной, т. е. $T=0$ и $p=0$. В соответствии с классической механикой частица в поворотных точках изменяет направление скорости на обратное.

Согласно квантовой механике возможно движение частицы с энергией $E<U$ вне ямы за точками поворота (это области $x<a$ и $x>b$).

Метод ВКБ позволяет найти волновую функцию как в классически доступном интервале значений: $x$ от $a$ до $b$, так и за поворотными точками. Но установить связи между выражениями для волновой функции, полученной для различных областей, довольно сложно, так как непосредственное «сшивание» в точках $a$ и $b$ невозможно.

При $x>b$ $p$ — чисто мнимая величина, так как $U>E$. Если принять $x_0=b$, то

$$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx}+\frac{C_2}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx}.$$

Второе слагаемое неограниченно возрастает при $x\to\infty$ и должно быть отброшено. Полагая $C_1=\frac{B}{2}$ и $C_2=0$, имеем

$$\psi=\frac{B}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx}\quad (x>b). \tag{6.27}$$

Опуская доказательство, укажем, что функции (6.27) соответствует в области $a<x<b$ функция

$$\psi_1=\frac{B}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx+\frac{\pi}{4}\right).$$

Аналогично в области перед поворотной точкой $a$

$$\psi=\frac{A}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|\,dx}\quad (x<a),$$

поэтому в интервале $a<x<b$ имеем

$$\psi_{II}=\frac{A}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right).$$

Исходя из требования однозначности волновых функций заключаем, что в любой точке между $a$ и $b$ $\psi_1(x)=\psi_{II}(x)$. Но для этого необходимо, чтобы сумма аргументов синуса в обеих функциях была кратна числу $\pi$:

$$\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)+\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)=(n+1)\,\pi,\ n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

Кроме того, следует положить $A=(-1)^n B$.

Итак,

$$\int_a^b p\,dx=\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),\ n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots \qquad (6.28)$$

Финитное движение частицы в классическом случае происходит по отрезку прямой от точки $a$ к $b$ и обратно. Условие квантования (6.28) целесообразно поэтому записать для полного цикла движения, распространяя интегрирование на интервал от $a$ до $b$ и обратно от $b$ до $a$. С учетом знака $p$ как проекции импульса на ось $Ox$

$$\int_a^b p\,dx+\int_b^a(-p)\,dx=2\int_a^b p\,dx.$$

Далее удобно перейти к фазовому пространству с координатами $p$ и $x$ (см. ч. I, § 25, п. 2). В нем условие квантования выразится формулой

$$\oint p\,dx=2\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right). \qquad (6.29)$$

Левую часть формулы (6.29) можно трактовать как площадь, ограниченную замкнутой траекторией изображающей точки в фазовом пространстве.

Достоинство квазиклассического приближения состоит в том, что в нем решение уравнения Шредингера сведено к квадратурам (6.26). Кроме того, во многих случаях оно приводит к сравнительно простым и физически ясным результатам, так как усматриваются прямые связи с соответствующими задачами классической механики.

Пример 6.2. **Применение метода ВКБ для расчета уровней энергии.** Положим $U=0$ при $a<x<b$ (прямоугольная потенциальная яма). Тогда из формулы (6.28) следует $\sqrt{2mE}2\,(b-a)=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$, откуда

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\,(b-a)^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2.$$

Результат отличается от точной формулы (5.8) для уровней энергии сдвигом значений квантовых чисел на $\frac{1}{2}$. Эта погрешность скажется на энергии нижних квантовых состояний. При $n\gg 1$ точность метода ВКБ достаточно высока.

Пример 6.3. **Расчет уровней энергии квантового осциллятора.** Сравним формулу классической механики для фазовой траектории осциллятора (см. ч. I, § 25)

$$\oint p\,dx=\frac{E}{\nu}$$

с условием квантования. Заключаем, что

$$\frac{E}{\nu}=2\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

нли

$$E=\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Это формула квантоваиия энергнн осцнллятора (6.18), полученная ранее в результате точного решеиия уравнення Шреднигера.

## Методические указания и рекомендации

**I.** Простейшие задачи, рассмотренные в главе, раскрывают квантово-механический подход к описанию движения и взаимодействия, не отягощенный еще применением абстрактного математического аппарата, дают материал для пояснения ниже сущности этого аппарата, приводят к очень общим и характерным закономерностям микромира. То, что эти задачи можно решить, не применяя понятия об операторе, операторной форме уравнения Шредингера, всей совокупности необходимых в других случаях сведений по гильбертову пространству и операторному исчислению, на наш взгляд, существенно в методическом отношении для выявления главных этапов и итогов решения.

В то же время подбор задач определяется типичностью описываемых в них ситуаций. В этом отношении обязательно нужна задача на прохождение потенциального барьера, хотя она довольно громоздка в выкладке. (Лектор может перенести вычисления на практические занятия.)

На практических занятиях нужно рассмотреть задачу о трехмерной яме, так как результаты ее решения используются далее в курсе статистической физики.

Задача об осцилляторе имеет фундаментальное для квантовой физики значение и анализируется подробно как на лекциях, так и на практических занятиях.

**II.** При изучении материала студентам рекомендуется ответить на следующие вопросы:

— В какой связи находится непрерывность волновой функции с определением вектора плотности потока вероятности? Как объяснить попадание микрочастиц в запрещенные законом сохранения энергии для их движения области пространства? Назовите явления, которые объясняются туннельным эффектом. Перечислите микросистемы, поведение которых можно моделировать квантовым осциллятором. Сделайте общие выводы о характерных особенностях движения в силовых полях в микромире на основе решенных в главе задач. Выполните упражнения к главе.

**Упражнение II**

**1.** Пользуясь результатами задачи об одномерной прямоугольной потенциальной яме (см. § 5, п. 2), решите задачу о трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Решение.

Потенциальная энергия задана условием:

$$U(x, y, z)=0, \text{ если } \begin{cases} 0<x<a, \\ 0<y<b, \\ 0<z<c, \end{cases}$$

$$U(x, y, z)=\infty, \text{ если } \begin{cases} x\leqslant 0,\ x\geqslant a, \\ y\leqslant 0,\ y\geqslant b, \\ z\leqslant 0,\ z\geqslant b. \end{cases}$$

Уравнение Шредингера для частицы внутри ямы имеет вид

$$\Delta\psi+k^2\psi=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{1}$$

Волновая функция обращается в нуль на краю ямы.

Уравнение (1) допускает разделение переменных. После подстановки

$$\psi(x, y, z)=\varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z)$$

получаем три однотипных уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k_1^2\varphi=0,$$

причем

$$k_1^2+k_2^2+k_3^2=k^2,$$

и выполняются граничные условия:

$$\varphi_1(0)=\varphi_1(a)=0, \quad \varphi_2(0)=\varphi_2(b)=0, \quad \varphi_3(0)=\varphi_3(c)=0.$$

Используя формулы (5.7), (5.8) и (5.9), получаем

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x, y, z)=\left(\frac{8}{abc}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\frac{\pi n_1x}{a}\sin\frac{\pi n_2y}{b}\sin\frac{\pi n_3z}{c},$$

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n_1}{a}\right)^2+\left(\frac{n_2}{b}\right)^2+\left(\frac{n_3}{c}\right)^2\right].$$

Состояние частицы задается тройкой квантовых чисел $n_1$, $n_2$ и $n_3$, пробегающих независимо друг от друга значения 1, 2, 3, ...

В кубической яме $a=b=c$. В этом случае уровни энергии вырождены, т. е. одному значению энергии соответствует несколько квантовых состояний.

**2.** С помощью формулы (5.23) оцените вероятность прохождения электроном прямоугольного потенциального барьера высотой 10 эВ при энергии частицы 5 эВ, если ширина барьера равна $1\cdot10^{-10}$ м, $2\cdot10^{-10}$ м, $5\cdot10^{-10}$ м. Константу $P_0$ принять равной 1.

Ответ. $P=0{,}1$; 0,008; $5{,}5\cdot10^{-7}$.

**3.** С помощью формулы (5.24) выведите закон Гейгера — Нэттола, связывающий период полураспада с энергией $\alpha$-частицы: $\ln T=A+\frac{B}{\sqrt{E}}$.

Р е ш е н и е.

Предположим, что внутри ядра α-частица движется свободно. Чтобы выйти из ядра, ей нужно преодолеть потенциальный барьер, образованный силами кулоновского отталкивания (см. рис. 5.4). При $r > r_0$

$$U = \frac{\gamma}{r}, \quad \gamma = 2Z\varkappa e^2,$$

где $Z$ — заряд ядра. Для коэффициента прохождения через барьер имеем формулу

$$P = P_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}\int_{r_0}^{R}\sqrt{U(r)-E}\,dr}$$

В ней $P_0$ — постоянная, зависящая от свойств ядра; точка $R$ определяется из условия $U(R)=0$; нижний предел интегрирования полагаем равным $r_0$.

Период полураспада обратно пропорционален вероятности вылета α-частицы за единицу времени, которая в свою очередь пропорциональна коэффициенту прохождения $P$. Поэтому $T = \frac{\text{const}}{P}$ и

$$\ln T = \text{const} - \ln P = \text{const} + \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{r_0}^{R}\sqrt{\frac{\gamma}{r} - E}\,dr.$$

После подстановки $r = \frac{\gamma x}{E}$ имеем

$$\ln T = \text{const} + \frac{2\gamma\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{E}}\int_{\frac{Er_0}{\gamma}}^{1}\sqrt{\frac{1}{x} - 1}\,dx = A + \frac{B}{\sqrt{E}},$$

где

$$B = \frac{2\gamma\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{\frac{Er_0}{\gamma}}^{1}\sqrt{\frac{1-x}{x}}\,dx. \qquad (2)$$

Так как энергия α-частицы значительно ниже пика барьера, то нижний предел в формуле (2) можно принять равным нулю.

**4.** Запишите выражения для волновой функции гармонического осциллятора при $n = 0, 1, 2$.

О т в е т.

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}x_0^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}(2x_0)^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\frac{2x}{x_0},$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}(8x_0)^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\left(4\frac{x^2}{x_0^2} - 2\right).$$

**5.** С помощью формулы (6.14) вычислите коэффициенты полиномов Чебышева — Эрмита $H_3$ и $H_4$.

**6.** Запишите выражения плотности вероятности для координаты $x$ в случае гармонического осциллятора, находящегося в квантовых состояниях при $n=0, 1, 2$. (Данные возьмите из задачи 4.)

Сравните результаты с плотностью вероятности для классического осциллятора.

Указание. Вероятность обнаружения классической материальной точки на отрезке $dx$ пропорциональна времени нахождения частицы на этом отрезке. Так как

$$dt=\frac{dx}{v}=\frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(E-U)}},$$

то

$$dW=\frac{\text{const}}{\sqrt{E-U}}.$$

**7.** Колебательные подуровни молекулы водорода расположены на расстоянии 0,545 эВ друг от друга. Вычислите энергию нулевых колебаний и частоту колебаний.

Указание. Ознакомьтесь с материалом § 19, п. 5.

# ГЛАВА III. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Полное и последовательное изучение основных законов квантовой механики и решение большинства ее задач невозможно без специального математического аппарата. Он разобран в данной главе. Мы не стремились к математической строгости и общности освещения затрагиваемых вопросов: они рассмотрены на элементарном уровне и лишь в той мере, которая необходима для понимания следующих глав, где изучается строение атомов и молекул.

## § 7. ЛИНЕЙНЫЕ САМОСОПРЯЖЕННЫЕ ОПЕРАТОРЫ

**7.1. Разложение функций в обобщенный ряд и интеграл Фурье.** Применение принципа суперпозиции состояний (см. § 2, п. 4) в квантовой механике тесно связано с разложением функций в ряд или интеграл Фурье. Напомним основные математические положения о разложениях функций. Пусть задана функция $\varphi=\varphi(k, x)$, причем $k$ есть дискретно изменяющаяся величина, играющая роль параметра, а под $x$ понимается совокупность трех координат точки пространства. Если значения $k$ пронумеровать в определенном порядке, то можно рассматривать систему функций, в которой функции можно различать по номеру и писать $\varphi_k(x)$ вместо $\varphi(k, x)$, причем $k=1, 2, 3$ и т. д.

Система функций $\varphi_k(x)$ называется ортонормированной, если все функции $\varphi_k(x)$ нормированы на единицу и попарно ортогональны. Условие ортонормированности выражается соотношением

$$\int \varphi_i^*(x)\,\varphi_k(x)\,dx=\delta_{ik},$$

где $\delta_{ik}$ — символ Кронекера ($\delta_{ik}=0$ при $i\neq k$ и $\delta_{ik}=1$ при $i=k$).

Система $\varphi_k(x)$ называется полной, если не существует функции, ортогональной ко всем функциям системы и не входящей в эту систему.

Допустим, что в интервале $a<x<b$ задана полная ортонормированная система функций $\varphi_k(x)$. Тогда любая непрерывная однозначная ограниченная и квадратично-интегрируемая в интервале $(a, b)$ функция $\psi(x)$ может быть представлена в виде ряда

$$\psi(x)=\sum_k C_k\,\varphi_k(x), \tag{7.1}$$

где числа $C_k$ определяются формулой

$$C_k=\int_a^b \varphi_k^*(x)\psi(x)\,dx.$$

Они называются коэффициентами Фурье, а ряд (7.1) — обобщенным рядом Фурье. Этот ряд в указанном интервале сходится, и сходится к функции $\psi(x)$ (за исключением конечного числа изолированных точек, к которым относятся точки разрывов непрерывности, концы интервала и др.).

Пусть имеется система функций $\varphi(k, x)$ с непрерывно изменяющимся параметром $k$. Она называется ортонормированной или нормированной на δ-функцию (сведения о δ-функции приведены в приложении I), если выполняется соотношение

$$\int \varphi^*(k', x)\,\varphi(k, x)\,dx=\delta(k'-k). \tag{7.2}$$

Ортонормированная система $\varphi(k, x)$ называется полной, если не существует функции, ортогональной ко всем функциям системы и не входящей в эту систему.

Произвольную непрерывную и квадратично-интегрируемую функцию $\psi(x)$ можно представить в виде интеграла Фурье:

$$\psi(x)=\int C(k)\,\varphi(k, x)\,dk, \tag{7.3}$$

где коэффициент Фурье $C(k)$ находят по формуле

$$C(k)=\int \varphi^*(k, x)\,\psi(x)\,dx.$$

Интеграл (7.3) для полной системы функций $\varphi(k, x)$ сходится, и сходится к функции $\psi(x)$ (везде, кроме ограниченного числа изолированных точек).

Из математики известны условия полноты системы функций $\varphi(k, x)$:

$$\sum_k \varphi_k^*(x')\,\varphi_k(x)=\delta(x-x'). \tag{7.3 а}$$

Для системы фуикций с иепрерывио измеияющимся параметром $k$ условие прнобретает вид

$$\int \varphi^*(k, x')\,\varphi(k, x)\,dk = \delta(x - x'). \qquad (7.3\,б)$$

В самом деле, подставляя в формальио иаписаиное равеиство (7.1) коэффициеиты Фурье $C_k$, получаем

$$\psi(x) = \sum_k \int_a^b \varphi_k^*(x')\,\psi(x')\,dx' \cdot \varphi_k(x) =$$
$$= \int \psi(x') \sum_k \varphi_k^*(x')\,\varphi_k(x)\,dx'.$$

Отсюда для выполиеиия равеиства (7.1) достаточио выполиеиия условия (7.3 а). (Так же доказывается и условие (7.3 б).)

Можио дать и иную трактовку сходимости разложеиий (7.1) и (7.3). Равеиство (7.1) имеет смысл, т. е. справедливо, если квадратичиая погрешиость разложеиия равиа иулю:

$$\int_a^b \left| \psi(x) - \sum_k C_k \varphi_k(x) \right|^2 dx = 0.$$

Отсюда иемедлеиио следует достаточиое условие справедливости равеиства (7.1):

$$\sum_k C_k^* C_k = \int_a^b \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx. \qquad (7.3\,в)$$

Аиалогичио для разложеиия (7.3) имеем

$$\int C^*(k)\,C(k)\,dk = \int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx. \qquad (7.3\,г)$$

Условия (7.3 в) и (7.3 г) также необходимы, т. е. для полной системы функций $\varphi_k(x)$ и непрерывной $\psi(x)$ всегда выполняются.

Установим связь разложений функций с принципом суперпозиции состояний. Пусть $\psi(x)$ есть волновая функция состояния некоторой механической системы. Разложим ее в ряд по функциям $\varphi_k(x)$. На основании равенства (7.1) или (7. 3) состояние $\psi$ может рассматриваться как суперпозиция состояний $\varphi_k$ (или $\varphi(k, x)$) с вероятностями $C_k^* C_k$ (или плотностью вероятности $C^*(k)\,C(k)$). Такой смысл придается разложению функции состояния в обобщенный ряд или интеграл Фурье: оно выражает суперпозицию состояний.

Как указывалось ранее (§ 2), волновые функции суть комплексные непрерывные однозначные функции от координат и времени. Как правило, они квадратично-интегрируемые, т. е. не только везде ограничены по модулю, но и достаточно быстро убывают до нуля на бесконечности, что и обусловливает возможность их использования для описания связанных состояний микрочастицы в ограниченной (и в большинстве случаев очень малой) области пространства. Но эти же свойства необходимы и для разложений в ряд или интеграл.

В кваитовой механике используются и фуикции, ие являющиеся квадратичио-иитегрируемыми Не удовлетворяет этому условию $\psi$-фуикция свободиой частицы (§ 3, п. 5) Эта и иекоторые другие подобиые ей фуикции фактически ие отвечают реальиым физическим состояииям, реальиым объектам, а описывают сильио идеализироваиные модели и играют вспомогательиую роль. Так, для каждой мнкрочастицы известиа в коиечиом счете область локализации в пространстве — это может быть

атом, молекула, макроскопическое тело и т. д. Локализованной частице соответствует уже не плоская волна, а волновой пакет, т. е. быстро затухающая и квадратично-интегрируемая функция состояния. В каждом конкретном случае может быть выяснена роль функции, не удовлетворяющей условию квадратичной интегрируемости, и установлена ее связь с реальными состояниями.

Изучаемые ниже математические соотношения, в которые входят волновые функции, распространяются не только на квадратично-интегрируемые функции, но и путем соответствующих предельных переходов — на ограниченные (по модулю) функции, необязательно затухающие на бесконечности.

Отметим также, что разложение функций состояний в ряд, а также все действия, которые производятся ниже над функциями с помощью операторов физических величин, не затрагивают переменную $t$ — время, т. е. относятся к произвольному, но фиксированному моменту времени. По этой причине время $t$ всегда рассматривается как параметр, а переменные $x$, $y$, $z$ — как аргументы $\psi$-функции.

**7.2. Линейные операторы.** *Оператор есть символ для обозначения действия или программы действий, которые нужно совершить над некоторой функцией, чтобы получить другую функцию.* Операторы обозначаются большими латинскими буквами со «шляпкой» наверху, например $\widehat{A}$, $\widehat{B}$, ... Если оператор стоит рядом с функцией и слева от нее, то это означает, что он действует на функцию (говорят, применяется к функции или умножается на функцию). В результате получается новая функция тех же переменных:

$$\widehat{A}\,\psi=\varphi.$$

(Функции $\psi$ и $\varphi$ должны относиться к одному классу функций; невозможен, например, переход от функции действительного переменного к функциям комплексного.)

Программа действий, заключенная в операторе, может быть выражена математическими символами или словами. Укажем примеры:

1) $\widehat{A}=x$ — оператор умножения на переменную $x$;

2) $\widehat{B}=\frac{\partial}{\partial x}$ — оператор дифференцирования по $x$;

3) $C=\{$перейти к комплексно-сопряженному выражению$\}$ — оператор комплексного сопряжения.

Результаты действий названных операторов выражаются равенствами

1) $\widehat{A}\varphi=x\varphi$; 2) $\widehat{B}\varphi=\frac{\partial\varphi}{\partial x}$; 3) $\widehat{C}\varphi=\varphi^*$.

Оператор называется ***линейным***, если для него выполняется условие

$$\widehat{L}\,(C_1\varphi_1+C_2\varphi_2)=C_1\widehat{L}\varphi_1+C_2\widehat{L}\varphi_2, \tag{7.4}$$

где $\varphi_1$ и $\varphi_2$ — некоторые функции, а $C_1$ и $C_2$ — постоянные (комплексные) числа. (Число слагаемых $C_k\varphi_k$ неограничено.) Например, операторы дифференцирования и операторы умножения на переменную величину линейны, оператор же возведения в степень не является линейным.

Согласно условию (7.4) постоянные множители можно выносить за знак линейного оператора (и вносить под него), а действие такого оператора дистрибутивно по отношению к сложению функций. Далее используются только линейные операторы.

*Символы операторов рассматриваются как самостоятельные математические объекты, над которыми можно производить ряд математических действий: сложение, умножение, возведение в степень, разложение в степенной ряд.*

Определим сумму и произведение операторов. Оператор $\widehat{C}$ называется суммой операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$, если выполняется равенство

$$\widehat{C}\varphi=\widehat{A}\varphi+\widehat{B}\varphi.$$

Из определения следуют формулы

$$\widehat{C}\varphi=(\widehat{A}+\widehat{B})\,\varphi$$

и

$$\widehat{C}=\widehat{A}+\widehat{B}.$$

Сложение ассоциативно и коммутативно:

$$(\widehat{A}+\widehat{B})+\widehat{C}=\widehat{A}+(\widehat{B}+\widehat{C}),$$
$$\widehat{A}+\widehat{B}=\widehat{B}+\widehat{A}.$$

Оператор $\widehat{C}$ называется произведением операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$, если справедливо равенство

$$\widehat{C}\varphi=\widehat{A}\,(\widehat{B}\varphi).$$

Скобки указывают порядок действий. Произведение операторов обозначается так же, как и произведение чисел:

$$\widehat{C}=\widehat{A}\widehat{B}.$$

Операция умножения в общем случае некоммутативна: $\widehat{A}\widehat{B}\neq\widehat{B}\widehat{A}$.

Операторы, для которых $\widehat{A}\widehat{B}=\widehat{B}\widehat{A}$, называются *коммутирующими*.

Оператор $\widehat{A}\widehat{B}-\widehat{B}\widehat{A}$ называется *коммутатором* операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$. Он обозначается символом $[\widehat{A}, \widehat{B}]$:

$$[\widehat{A}, \widehat{B}]=\widehat{A}\widehat{B}-\widehat{B}\widehat{A}.$$

Для коммутирующих операторов $[\widehat{A}, \widehat{B}]=0$.

Пример 7.1. **Произведение операторов.**

Если $\widehat{A}=x$ и $\widehat{B}=\frac{\partial}{\partial x}$, то $\widehat{A}\widehat{B}=x\frac{\partial}{\partial x}$, причем $\widehat{A}\widehat{B}\psi=\widehat{A}\,(\widehat{B}\psi)=x\frac{\partial}{\partial x}\psi$.

В то же время $\widehat{B}\widehat{A}=\frac{\partial}{\partial x}x$, поэтому

$$\widehat{B}\widehat{A}\psi=\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)=\psi+x\frac{\partial}{\partial x}\psi.$$

Отсюда заключаем, что $\widehat{A}\widehat{B}\neq\widehat{B}\widehat{A}$.

Пример 7.2. **Коммутирующие операторы.**

Если $\widehat{A}=x$ и $\widehat{B}=\frac{\partial}{\partial y}$, то $[\widehat{A}, \widehat{B}]\,\varphi=x\frac{\partial\varphi}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}(x\varphi)=0$.

Операторы перестановочны, т. е. коммутируют.

**7.3. Собственные функции и собственные значения операторов.** Равенство

$$\hat{A}\varphi = a\varphi, \tag{7.5}$$

где $\hat{A}$ — оператор; $a$ — число (в общем случае комплексное); $\varphi$ — функция, называется *уравнением для собственных функций и собственных значений оператора* (если задан оператор $\hat{A}$ и требуется найти $\varphi$ и $a$). Если функция удовлетворяет рассмотренным выше стандартным требованиям для $\psi$-функций, то она называется *собственной функцией* оператора $\hat{A}$, принадлежащей его *собственному значению* $a$. Совокупность всех собственных значений называется *спектром оператора*. Спектр бывает *дискретным, непрерывным* или *смешанным*.

Решения уравнения (7.5) могут оказаться функциями состояния некоторой механической системы. Поэтому на функции $\varphi$ либо в процессе решения уравнения (7.5), либо после решения накладываются рассмотренные выше стандартные требования непрерывности, однозначности, ограниченности во всех точках пространства и (не всегда) квадратичной интегрируемости.

Собственное значение называется *вырожденным*, если ему соответствует несколько линейно независимых собственных функций. Кратность вырождения определяется числом таких функций.

Пример 7.3. **Нахождение собственных значений и собственных функций оператора.**

Возьмем оператор $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$. Уравнение (7.5) для него имеет вид

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = a\varphi. \tag{7.6}$$

Положим $a = -\omega^2$. Уравнение (7.6) при всех действительных $\omega$ имеет два независимых решения: $e^{i\omega x}$ и $e^{-i\omega x}$, удовлетворяющих требованиям однозначности, непрерывности и ограниченности по модулю. Отсюда видно, что спектр оператора $\hat{A}$ непрерывен и охватывает все отрицательные действительные числа. Каждое собственное значение двукратно вырождено. Заметим, что любая линейная комбинация $C_1e^{i\omega x} + C_2e^{-i\omega x}$ также является собственной функцией оператора $\hat{A}$, принадлежащей тому же собственному значению: $a = -\omega^2$.

Коммутирующие операторы имеют общую систему собственных функций. Это означает, что любая собственная функция одного оператора является также собственной функцией другого оператора. Например, экспонента $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ является собственной функцией операторов $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial y}$ и $\frac{\partial}{\partial z}$.

**7.4. Самосопряженные операторы.** Оператор $\hat{A}$ называется самосопряженным или эрмитовым, если выполняется равенство

$$\int \psi^*(x)\,\hat{A}\varphi(x)\,dx = \int [\hat{A}\psi(x)]^*\,\varphi(x)\,dx. \tag{7.7}$$

Здесь $\psi$ и $\varphi$ — функции, для которых выполнение всех указанных действий в (7.7) имеет смысл.

Пример 7.4. **Самосопряженные операторы.**

Самосопряженными операторами являются, например $\hat{A} = x$ и $\hat{A} = i\frac{d}{dx}$. Для

оператора умножения на переменную $x$ это очевидно. Для другого оператора имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A}\varphi dx = i\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d\varphi}{dx} dx =$$

$$= i\psi^*\varphi \Big|_{-\infty}^{\infty} - i\int_{-\infty}^{\infty} \varphi \frac{d\psi^*}{dx} dx = i\psi^*\varphi \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi (\hat{A}\psi)^* dx$$

Если допустить, что $\psi$ и $\varphi$ обращаются в нуль на бесконечности, то приходим к равенству (7.7).

Самосопряженный оператор может действовать не только на затухающие в бесконечности функции. Рассмотрим оператор $\hat{A} = i\frac{d}{dx}$ и функции $\psi = e^{ikx}$, $\varphi = e^{iqx}$. Подстановка их в правую и левую части равенства (7.7) дает

$$\int \psi^* \hat{A}\varphi dx = -q2\pi\delta(q-k),$$

$$\int \varphi (\hat{A}\psi)^* dx = -k2\pi\delta(k-q).$$

Выполнение символического равенства $q\delta(q-k) = k\delta(k-q)$ свидетельствует о самосопряженности оператора.

*Сумма самосопряженных операторов есть самосопряженный оператор.* (То же можно сказать о произведении, если операторы коммутируют.)

Применение самосопряженных операторов в квантовой механике обусловливается прежде всего тем, что их собственные значения всегда *вещественны*. Пусть выполняется равенство (7.5). Подставим функцию $\varphi$ вместо $\psi$ в формулу (7.7):

$$\int \varphi^* \hat{A}\varphi dx = \int (\hat{A}\varphi)^* \varphi dx,$$

или

$$a\int |\varphi|^2 dx = a^* \int |\varphi|^2 dx,$$

$$a = a^*.$$

Собственные значения оказались вещественными числами.

Собственные функции эрмитовых операторов *попарно ортогональны*. Пусть $\varphi_1$ и $\varphi_2$ — собственные функции оператора $\hat{A}$, соответственно принадлежащие разным собственным значениям: $a_1$ и $a_2$. Тогда

$$\hat{A}\varphi_1 = a_1\varphi_1, \quad \hat{A}\varphi_2 = a_2\varphi_2.$$

Подставим $\varphi_1$ и $\varphi_2$ в равенство (7.7) вместо $\psi$ и $\varphi$. Получим

$$\int \varphi_1^* \hat{A}\varphi_2 dx = \int (\hat{A}\varphi_1)^* \varphi_2 dx,$$

или

$$a_2 \int \varphi_1^* \varphi_2 dx = a_1 \int \varphi_1^* \varphi_2 dx.$$

Отсюда видно, что

$$\int \varphi_1^* \varphi_2 dx = 0.$$

Поскольку уравнение (7.5) для собственных функций оператора определяет функции с точностью до постоянного множителя, то их

можно нормировать на единицу (или, если функции не затухают на бесконечности, нормировать на δ-функцию).

Собственные функции самосопряженного оператора, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны друг другу. Было показано, что это справедливо для невырожденных собственных значений. Вырожденные собственные функции, относящиеся к одному и тому же собственному значению, вообще говоря, неортогональны друг другу.

Пусть $\varphi_i$ — такие функции; кратность вырождения равна $n$. Составим из них $n$ линейных комбинаций:

$$\psi_k = \sum_i b_{ki} \varphi_i.$$

Функции $\psi_k$ также являются собственными функциями рассматриваемого оператора и принадлежат тому же собственному значению. Если

$$\hat{A}\varphi_i = a\varphi_i,$$

то и

$$\hat{A}\psi_k = a\psi_k.$$

Числа $b_{ki}$ подбирают так, чтобы функции $\psi_k$ были нормированы и ортогональны друг другу.

Из сказанного ясно, что собственные функции самосопряженного оператора всегда можно выбрать таким образом, чтобы они образовали ортонормированную систему.

Важнейшей особенностью эрмитовых операторов, обусловливающих их применение в квантовой механике, наряду с вещественностью собственных значений является *полнота системы собственных функций*. Это значит, что в случае дискретного спектра по собственным функциям эрмитового оператора может быть разложена любая функция состояния в обобщенный ряд Фурье. В случае непрерывного спектра разложение производится в интеграл Фурье.

Заметим, что индекс собственной функции оператора, одновременно являющийся индексом его собственного значения, часто есть некоторое квантовое число, входящее в формулу собственного значения (см. пример 7.5). В случае непрерывного спектра он играет роль непрерывного параметра, входящего в собственную функцию (см. функции состояния свободной частицы (3.22)).

Пример 7.5 **Система собственных функций и собственных значений оператора.**

Вернемся к системе функций стационарных состояний для микрочастицы в потенциальной яме (§ 5, п 2). Если уравнение (5.4) записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = E_n\psi_n,$$

то оно окажется уравнением для собственных функций $\psi_n$ оператора $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, принадлежащих различным значениям энергии $E_n$. Система функций (5.7) является полной, и по ней можно разложить любую функцию $\psi$, ограниченную на интервале $0 \leqslant x \leqslant a$.

Аналогично положение с задачей об осцилляторе (см. § 6). Если уравнение (6.2) записать в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi_n = E_n\psi_n,$$

то окажется, что $\psi_n$ — собственные функции оператора, заключенного в скобки,

принадлежащие различным значениям энергии $E_n$. Система функций $\psi_n$ является полной, и по ней может быть разложено общее решение уравнения (6.2).

Из примеров видно, что в стационарных состояниях энергия принимает значения, собственные для некоторого оператора. Забегая вперед, скажем, что определенные значения физической величины — это спектр собственных значений ее оператора.

## § 8. АКСИОМАТИКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

**8.1. Математический аппарат квантовой механики.** В каждой фундаментальной физической теории применяются свои специфические математические средства — математический аппарат. В классической механике это векторы и дифференциальные уравнения, в электродинамике добавляется векторный анализ. В квантовой механике математический аппарат заимствован из математической теории линейных самосопряженных операторов. (С элементами этой теории читатель познакомился в предыдущем параграфе.)

Применение математического аппарата в квантовой механике основано на нескольких постулированных утверждениях; опираясь на них, можно хотя бы в принципе решить все конкретные задачи. В данном параграфе рассматривается часть этих положений, далее по мере необходимости к ним добавится еще несколько постулатов.

Ниже даются такие формулировки, чтобы в дальнейшем их можно было использовать как для изучения одной частицы, так и системы частиц. (Однако в тексте параграфа слово «система» применяется главным образом к простейшему объекту — микрочастице, находящейся во внешнем потенциальном поле. Распространение всех понятий и законов на системы нескольких частиц обсуждается в главе V.)

Обратим внимание читателя на то, что изложение физических теорий, как правило, отличается от чисто дедуктивных математических построений: в них обычно не выделяется минимальный и полный перечень аксиом. Физика всегда апеллирует к опыту и опирается на оптимальную, т. е. наиболее удобную для практики, систему аксиом.

**8.2. Операторы и допустимые значения физических величин.** Мы уже видели на примере решения простейших задач квантовой механики, что энергия микросистем принимает *дискретные значения*, т. е. определенным образом *квантуется*. Это значит, что использовать для энергии и ряда других физических величин просто вещественные (действительные) числа или векторы, как это делалось в классической механике и электродинамике, нельзя: не все точки числовой оси для энергии допустимы (например, см. задачу о гармоническом осцилляторе). Связь между физической величиной и ее математической моделью устанавливается постулатом: *в квантовой механике основным физическим величинам сопоставляются линейные самосопряженные операторы.*

Обычно оператор обозначается той же буквой, что и величина в классической физике.

Исходным являются операторы координаты и импульса. *Посту-*

*лируется, что оператор координаты $x$ есть действие умножения на эту переменную:*

$$\hat{x}=x.$$

*Оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ выражается формулой*

$$\hat{p}_x=-ih\frac{\partial}{\partial x}. \tag{8.1}$$

Операторы других физических величин можно найти, руководствуясь простым правилом, вытекающим из принципа соответствия между классической и квантовой физикой: *соотношения между операторами физических величин такие же, как и между этими величинами в классической физике* (если в результате действий получается самосопряженный оператор).

Правило позволяет сразу написать формулы для операторов важнейших механических величин:

*радиус-вектор*

$$\hat{\vec{r}}=\vec{i}\hat{x}+\vec{j}\hat{y}+\vec{k}\hat{z}=\vec{r}, \tag{8.1-1}$$

*импульс*

$$\hat{\vec{p}}=\vec{i}\,\hat{p}_x+\vec{j}\,\hat{p}_y+\vec{k}\,\hat{p}_z=-i\hbar\nabla, \tag{8.1-2}$$

*момент импульса*

$$\widehat{\vec{L}}=[\hat{\vec{r}}\,\hat{\vec{p}}]=-i\hbar[\vec{r}\nabla], \tag{8.1-3}$$

*кинетическая энергия*

$$\widehat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \tag{8.1-4}$$

*потенциальная энергия*

$$\widehat{U}=U(\vec{r},\,t)=U(x,\,y,\,z,\,t), \tag{8.1-5}$$

*полная механическая энергия*

$$\widehat{H}=\widehat{T}+\widehat{U}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(x,\,y,\,z,\,t). \tag{8.1-6}$$

Оператор полной энергии называется *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом*. Он обозначается символом $\widehat{H}$, так как в общем случае это квантовый аналог классической функции Гамильтона. Далее мы увидим, что оператор Гамильтона играет особо важную роль, ибо его собственные функции оказываются волновыми функциями стационарных состояний. Кроме того, он входит в основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера.

Связь между оператором и наблюдаемыми при измерениях значениями физической величины дается постулатом: *физическая величина может принимать те и только те значения, которые совпадают с собственными значениями ее оператора.*

Пример 8.1. **Собственные функции и собственные значения оператора импульса.**

Имеем уравнение

$$\hat{p}_x \varphi(x) = p_x \varphi(x),$$

или

$$-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} = p_x \varphi.$$

Произведем разделение переменных:

$$\frac{d\varphi}{\varphi} = \frac{i}{\hbar} p_x dx.$$

Отсюда

$$\ln \varphi = \frac{i}{\hbar} p_x x + \ln C$$

и

$$\varphi = C e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}.$$

Коэффициент $C$ определяется условием нормировки на $\delta$-функцию, после чего

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \tag{8.2}$$

Чтобы функции (8.2) были всюду ограничены, значения $p_x$ должны быть действительными числами. Отсюда видно, что спектр оператора проекции импульса — это совокупность всех действительных чисел.

Пример 8.2. **Собственные функции и собственные значения оператора координаты $x$.**

Уравнение

$$\hat{x} \varphi_{x_0}(x) = x_0 \varphi_{x_0}(x)$$

не имеет решений среди обычных функций. Исходя из свойств $\delta$-функции легко проверить выполнение символического равенства

$$x\delta(x - x_0) = x_0 \delta(x - x_0).$$

Действительно,

$$\int x \delta(x - x_0)\, dx = x_0 \int \delta(x - x_0)\, dx = x_0.$$

Поэтому собственные функции оператора $x$ суть $\varphi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$, где $x_0$ — любое действительное число.

Вид оператора импульса и операторов ряда других величин не зависит от свойств частиц и тех физических условий, в которых происходит их движение. Поэтому спектр этих операторов всегда один и тот же. Но вид оператора Гамильтона и его собственные значения различны для различных частиц и зависят от вида силового поля, действующего на частицы.

В связи с вопросом об операторах физических величин важно заметить, что не все физические величины представлены операторами. Такие характеристики микрочастицы, как масса, электрический заряд, важнейшие физические постоянные в нерелятивистской квантовой механике являются не операторами, а вещественными числами, входящими в формулы и уравнения в качестве параметров. Можно сказать, что *величина, построенная по принципу соответствия из операторов координат и импульса, сама есть оператор.* В противном случае (в нашем курсе за исключением не имеющейся в классической физике величины — спина микрочастицы) это число.

**8.3. Описание состояния квантовой системы и его изменения со временем.** Следующий постулат относится к функциям, которые мы ранее назвали волновыми или функциями состояния.

*Наиболее полное описание состояния квантовой системы достигается заданием соответствующей этому состоянию волновой функции.*

В ней заключена вся информация *о* системе. Функция состояния позволяет определить плотность вероятности для положения частицы (или совокупности частиц) в пространстве и ее изменение во времени. С помощью волновой функции осуществляется расчет возможных результатов физических экспериментов и измерений физических величин, определяются средние значения физических величин в заданном состоянии и извлекается другая информация. Изменение волновой функции со временем отражает эволюцию состояния квантовой системы под действием внешних сил.

Для определения функции состояния в каждом конкретном случае микросистемы и взаимодействия в ней или с внешними объектами постулируется основное уравнение.

*Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шредингера:*

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=\widehat{H}\psi. \tag{8.3}$$

Записанное в таком виде уравнение пригодно для любых квантовых объектов. В зависимости от того, изучается ли отдельная частица, атом или кристалл в целом — изменяется вид оператора Гамильтона $\widehat{H}$, структура же уравнения остается одной и той же. С частным случаем уравнения Шредингера мы уже знакомились раньше. Подставляя в уравнение (8.3) гамильтониан (8.1—6), получаем уравнение (3.1).

Можно говорить об аналогии между основной задачей классической механики — по силовому полю с помощью второго закона Ньютона найти кинематическое уравнение движения материальной точки $\vec{r}=\vec{r}(t)$ — и основной задачей квантовой механики — по заданному гамильтониану системы с помощью уравнения Шредингера найти функцию состояния $\psi(\vec{r}, t)$.

Оператор Гамильтона характеризует микросистему с динамической стороны; его вид зависит от масс частиц, их электрических зарядов, взаимодействия между ними. Ему принадлежит особая роль в квантовой механике, ибо знание гамильтониана необходимо для составления основного уравнения. В принципе гамильтониан должен быть задан в конкретных задачах квантовой механики подобно тому, как задаются сила в классической механике при использовании уравнения второго закона Ньютона или же функции Лагранжа и Гамильтона при использовании соответствующих уравнений аналитической механики. В ряде случаев гамильтонианы строят по принципу соответствия, используя классические выражения и заменяя в них координаты и импульсы на соответствующие операторы.

Волновые функции — решения уравнения Шредингера — являются комплексными функциями вещественных переменных. Аргументы волновой функции — координаты частиц и время, причем

для многих действий над функциями время является параметром. Если силовое поле стационарно, то уравнение (8.3) допускает решения вида

$$\psi(x, y, z, t)=\varphi(x, y, z)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Координатная часть функции состояния $\varphi(x, y, z)$ является собственной функцией гамильтониана, т. е. удовлетворяет уравнению

$$\widehat{H}\varphi_E=E\varphi_E. \tag{8.4}$$

Поэтому действительная величина $E$ является полной энергией системы.

Уравнение (8.4) называется *стационарным* уравнением Шредингера. Подставляя в него гамильтониан (8.1), получаем уравнение (3.7), с помощью которого выше изучались стационарные состояния одной частицы в потенциальных полях простейшего вида.

Пример 8.3. **Собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона для свободной частицы.**

Энергия свободной частицы описывается оператором: $\widehat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$; следовательно, вместо (8.4) имеем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi=E\varphi.$$

Решение этого уравнения найдено в гл. I, § 3, п. 5:

$$\varphi=Ce^{i\vec{k}\vec{r}},$$

где $k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$. Решение имеет смысл при всех положительных значениях $E$. Таким образом, $\varphi$ — собственные функции оператора $\widehat{T}$ с непрерывным спектром (положительных) собственных значений: $0<E<\infty$.

Пример 8.4. **Собственные функции и собственные значении оператора Гамильтона для осциллятора.**

Оператор Гамильтона в данном случае имеет вид

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Уравнение (8.4) при подстановке в него этого оператора конкретизируется:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi=E\psi.$$

Но это уже решенное ранее уравнение (6.2); собственные функции оператора $\widehat{H}$ — умноженные на экспоненту полиномы Чебышева — Эрмита (6.16), а спектр его собственных значений определяется формулой (6.18): $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$, $n=0, 1, 2, \ldots$

Поскольку уравнение (8.4) есть уравнение в частных производных, то его конкретное решение $\psi$ существенно зависит от граничных условий. Так, дискретный характер спектра энергии состояний во многих случаях определяется требованием затухания $\psi$-функции на бесконечности.

В случае нестационарного поля общее решение уравнения (8.3) есть некоторая функция времени. Для ее определения необходимо знание начального условия, т. е. вида волновой функции в на-

чальный момент времени. Дальнейшая эволюция состояния определяется уравнением Шредингера через найденную в процессе его решения зависимость: $\psi = \psi(t)$.

**8.4. Вероятности отдельных значений физической величины.** Состояние квантовой системы описывается волновой функцией, но это еще не говорит о том, какими значениями физических величин система характеризуется. До измерения такой информации не существует. Результат же измерения не всегда однозначен. Обнаружение на опыте того или иного значения физической величины в некоторых случаях является случайным событием. Тогда и говорят, что *величина не имеет определенного значения.* Однако можно теоретически заранее рассчитать вероятность или частоту появления данного значения при многократных измерениях, располагая функцией состояния. Она определяется постулатом: *вероятность того, что при измерении получится значение $a_i$ физической величины $A$, равна квадрату модуля соответствующего коэффициента Фурье в разложении волновой функции в ряд или интеграл Фурье по собственным функциям оператора этой физической величины.*

Пусть $\psi$ — волновая функция частицы. Чтобы рассчитать искомые вероятности, представим ее в виде ряда

$$\psi(x) = \sum_i C_i \varphi_i(x),$$

где $\varphi_i$ — собственные функции оператора $\widehat{A}$, имеющего дискретный спектр. Тогда вероятность получения $a_i$ есть

$$W_i = C_i^* C_i = \left| \int \varphi_i^* \psi \, dx \right|^2. \tag{8.5}$$

В случае непрерывного спектра волновая функция разлагается в интеграл Фурье. Если $\varphi(a, x)$ — собственная функция, то

$$\psi(x) = \int C(a)\, \varphi(a, x)\, da.$$

Поскольку теперь имеется непрерывное множество значений величины $A$, то в строгом смысле слова нельзя говорить о вероятностях отдельных значений. Речь идет только об элементарной вероятности $dW(a)$ попадания значения величины в интервал от $a$ до $a + da$. По формуле теории вероятностей имеем

$$dW(a) = w(a)\, da.$$

Здесь плотность вероятности, или дифференциальная функция распределения вероятностей $w(a)$, равна квадрату модуля коэффициента $C(a)$:

$$w(a) = C^*(a)\, C(a) = \left| \int \varphi^*(a, x)\, \psi(x)\, dx \right|^2.$$

Нетрудно заметить, что определенного значения у величины нет, если функция состояния не является собственной для оператора этой величины. Особый случай возникает, если волновая функция совпадает с какой-нибудь собственной функцией оператора. Пусть $\widehat{A}\varphi_i = a_i \varphi_i$. Если $\psi(x) = \varphi_i(x)$, то $C_i = 1$, а все $C_{k \neq i} = 0$. Тогда при измерении получается только одно значение $a_i$. Следовательно,

частица находится в состоянии с *определенным* значением величины $A$.

Иногда уже по виду волновой функции можно указать значение некоторой величины в данном состоянии. Так, волновая функция свободного движения $e^{ikx}$ совпадает с собственной функцией оператора $\hat{p}_x$, если $k=\frac{p_x}{\hbar}$ (см. выражение (8.2)). Поэтому она описывает состояние с заданным импульсом.

Пример 8.5. **Нахождение вероятности значения величины в дискретном спектре.**

Задано состояние частицы в потенциальной яме следующей волновой функцией:

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}+\sqrt{\frac{1}{3}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}$$

Коэффициенты разложения по ортонормированиым функциям $\varphi_i=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi xi}{a}$, $i=1, 2, 3, \ldots$, есть $C_i=\sqrt{\frac{2}{3}}$, $C_2=\sqrt{\frac{1}{3}}$. Поэтому вероятность обнаружения значения энергии частицы $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ составляет $\frac{2}{3}$, а значения $E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ составляет $\frac{1}{3}$ (см. формулу (5.8)).

Пример 8.6. **Нахождение вероятности значения величины в непрерывном спектре.**

Если функция состояния $\psi$ не совпадает ни с одной собственной функцией оператора $\hat{p}_x$, то в данном состоянии импульс не имеет определенного значения. Запишем разложение волновой функции в интеграл Фурье по собственным функциям оператора $\hat{p}_x$:

$$\psi=\int\limits_{-\infty}^{\infty}C(p_x)\,e^{\frac{i}{\hbar}(p_xx-Et)}dp_x. \tag{8.6}$$

Таким образом, произвольное состояние одномерного движения представляется в виде линейной комбинации состояний с определенными значениями импульса. При измерении действие прибора на частицу выделит одну компоненту из суперпозиции состояний (8.6). Какую именно, заранее указать нельзя. Взаимодействие с измерительным прибором описывается только статистически. Коэффициент $C(p_x)$, с которым состояние с импульсом $p_x$ входит в интеграл (8.6), рассматривается в качестве меры потенциальных возможностей для частицы проявить себя как объект с импульсом $p_x$.

Пример 8.7. **Вероятность значения координаты микрочастицы.**

Под общее правило нахождения вероятностей отдельных значений физических величин подпадает и определение вероятности для положения частицы. Собственные функции оператора $x$ были найдены ранее, в § 8, п. 2. Если

$$\psi(x')=\int C(x)\,\delta(x-x')\,dx,$$

то

$$C(x)=\int\psi(x')\,\delta(x-x')\,dx'=\psi(x).$$

Тогда плотность вероятности для координаты $x$ равна: $|C(x)|^2=|\psi(x)|^2$, что совпадает с определением плотности вероятности (2.2).

**8.5. Вычисление средних значений физических величин.** В случае, когда величина определенного значения не имеет, определяют

среднее значение достаточно большого числа измерений:

$$\bar{a}=\frac{\sum_{k=1}^{n} a_k}{n}.$$

Для вычисления среднего значения физической величины на основе теории достаточно знать функцию состояния частицы. (Предполагается, что вид оператора этой величины известен.) Если $a_i$ — собственные значения оператора $\hat{A}$ и $W_i$ — вероятности их обнаружения, то по теореме о среднем из теории вероятностей

$$\bar{a}=\sum_i W_i a_i.$$

(Для простоты рассматриваем случай дискретного спектра.) Используя формулу для расчета вероятностей (8.5), получаем

$$\bar{a}=\sum_i a_i C_i^* C_i=\sum_i a_i C_i \int \varphi_i \psi^* dx,$$

где $\psi$ — волновая функция частицы, а $\varphi_i$ — собственные функции оператора $\hat{A}$. Согласно (7.5)

$$\hat{A}\varphi_i=a_i\varphi_i,$$

поэтому

$$\bar{a}=\sum_i C_i \int \psi^* (a_i\varphi_i)\, dx=\sum_i C_i \int \psi^* (\hat{A}\varphi_i)\, dx.$$

Учитывая линейность оператора $\hat{A}$ и равенство $\psi=\sum_i C_i\varphi_i$, получаем

$$\sum_i C_i \int \psi^* (\hat{A}\varphi_i)\, dx=\int \psi^* (\hat{A}\sum_i C_i \varphi_i)\, dx=\int \psi^* \hat{A}\psi dx.$$

Итак,

$$\bar{a}=\int \psi^* (x)\, \hat{A}\psi (x)\, dx. \qquad (8.7)$$

Вычисление средних имеет важное значение при изучении микромира. Когда в рассматриваемом состоянии физическая величина не имеет определенного значения, среднее значение в какой-то мере характеризует состояние.

Понятно, что если $\psi=\varphi_i$, то

$$\bar{a}=\int \psi^* (x)\, \hat{A}\psi (x)\, dx=a_i \int \varphi_i^* \varphi_i\, dx=a_i.$$

В заключение вопроса заметим следующее. В стационарном состоянии

$$\psi (x,\ t)=\varphi (x)\, e^{-iwt}.$$

Если оператор физической величины не содержит времени, то его собственные функции и собственные значения также не зависят от времени. Поэтому в стационарных состояниях распределение ве-

роятностей для значений рассматриваемой величины также оказывается стационарным, независящим от времени. Постоянно и среднее значение. Для доказательства достаточно подставить в выражения (8.5) и (8.7) волновую функцию стационарного состояния и учесть, что временные множители за счет комплексного сопряжения при умножении дают единицу.

Пример 8.8. **Вычисление среднего значения величины.**

Найдем среднее значение координаты, энергии и импульса для частицы в потенциальной яме. Используя функцию состояния (5.7), соответствующие операторы и формулу (8.7), имеем

$$\bar{x}=\int_0^a\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\right)^2 x\,dx=\frac{a}{2},$$

$$\bar{E}=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\right)dx=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2},$$

$$\bar{p}=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\right)dx=0.$$

Истолкование результатов очевидно: по графикам плотности вероятности (см. рис. 5.2) усматривается их симметрия относительно средней точки ямы, что и приводит к найденному среднему значению координаты. Энергия имеет определенное значение, а импульс с равной вероятностью направлен и вправо, и влево.

Пример 8.9. **Обоснование выбора операторов координаты и импульса с помощью формулы среднего значения.**

Выбор исходных операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$, определенный аксиомами (§ 8, п. 2), не является случайным. Он согласован со статистической трактовкой функции состояния. В самом деле, выражение для среднего значения координаты

$$\bar{x}=\int w(x)\,x\,dx$$

можно записать в форме (8.7):

$$\bar{x}=\int\psi^*\hat{x}\psi\,dx,$$

откуда и вытекает, что $\hat{x}=x$.

Для получения оператора импульса разложим произвольную функцию состояния по плоским волнам (фиксируя момент времени):

$$\psi(x,\,t)=\int\varphi(p,\,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp,$$

коэффициенты разложения обозначены через $\varphi(p,\,t)$. В соответствии с постулатом § 8, п. 4 величина $\varphi^*\varphi$ выражает плотность вероятности значений импульса в состоянии $\psi(x,\,t)$, поэтому можно найти среднее значение импульса:

$$\bar{p}=\int\varphi^*(p)\,\varphi(p)\,p\,dp. \tag{8.7а}$$

Так как параметры $\varphi(p)$ являются коэффициентами разложения функции $\psi(x)$ в интеграл Фурье, то они вычисляются по формуле

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx. \tag{8.7б}$$

Подставляя значения $\varphi(p)$ из соотношения (8.7б) в формулу (8.7а), после вычислений приходим к равенству

$$\bar{p}=\int\varphi^*(p)\,p\varphi(p)\,dp=\int\psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\,dx,$$

откуда и следует, что оператор импульса (проекция на ось $Ox$) выражается формулой

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \tag{8.8}$$

Таким образом, трактовка волновой функции, гипотеза де Бройля, принцип соответствия между классической и квантовой механикой определяют виды операторов в математическом формализме теории.

**8.6. Коммутация операторов — условие существования определенных значений двух физических величин в одном и том же состоянии системы.** Пусть заданы операторы двух физических величин $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$. Достаточным условием для существования определенных значений их является наличие общей собственной функции, совпадающей с функцией состояния системы:

$$\widehat{A}\psi = a\psi, \tag{8.9}$$

$$\widehat{B}\psi = b\psi. \tag{8.10}$$

Выясним связь между операторами в этом случае. Действуя на обе части равенства (8.9) оператором $\widehat{B}$, а на (8.10) — оператором $\widehat{A}$, получим

$$\widehat{B}\widehat{A}\psi = ab\psi,$$

$$\widehat{A}\widehat{B}\psi = ba\psi.$$

Отсюда следует, что $\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A}$, т. е. *операторы коммутируют.*

Коммутирующие операторы имеют общие собственные функции (см. § 7, п. 3), т. е. условие коммутации двух операторов также и необходимо для существования определенных значений соответствующих величин.

Итак, *если операторы коммутируют, то возможно существование одновременно измеримых точных значений соответствующих величин.*

Пример 8.10. **Коммутация оператора импульса и кинетической энергии.** Выполнением действий убеждаемся, что

$$\hat{p}\widehat{T} = \widehat{T}\hat{p},$$

откуда следует совместная измеримость этих двух величин. Так, в свободном состоянии у микрочастицы определенные значения имеют импульс и энергия.

Пример 8.11. **Вычисление коммутатора для координаты и импульса.** Коммутатор

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right).$$

Поэтому

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\varphi = -i\hbar\left(x\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\varphi\right) = i\hbar\varphi.$$

Отсюда видно, что

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar,$$

операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$ *не коммутируют.* Значит, не существует состояний, в которых были бы вместе точно заданы координата $x$ и проекция импульса $p_x$. (Это положение отражено также в соотношениях неопределенностей.)

Свойство коммутативности не является транзитивным. Если $\widehat{A}$ коммутирует с $\widehat{B}$ и $\widehat{C}$, то это не значит, что $\widehat{B}$ и $\widehat{C}$ коммутируют между собой. Поэтому несколько величин могут вместе иметь определенные

значения, если только операторы этих величин попарно коммутируют.

Пример 8.12. **Измерение трех величин.**

Из операторов $\hat{p}$, $\hat{T}$, $\hat{H}$ коммутируют между собой только $\hat{p}$ и $\hat{T}$. Для других пар коммутаторы не равны нулю. Поэтому состояний с определенными значениями импульса, кинетической энергии и полной энергии не существует, за исключением случая свободной частицы, когда $\hat{H}=\hat{T}$.

В квантовой теории используется понятие *полного набора* физических величин, которые для данной системы могут иметь одновременно определенные значения. Например, для свободного движения одной частицы — это импульс и энергия. Задание полного набора однозначно определяет волновую функцию системы. Это можно понять из следующих рассуждений. Волновая функция есть решение уравнения Шредингера. Последнее же представляет собой не одну, а целое семейство функций. Выбор из них делается с помощью заданного набора величин.

В полный набор не могут входить все величины, характеризующие состояния соответствующих классических систем. Существуют, например, состояния с заданными моментами импульса и полной энергией. Однако в таких состояниях нельзя указать точные значения для координат частицы, ее потенциальной энергии. Поэтому говорят, что полный набор охватывает не более половины тех параметров, которыми характеризуются состояния классических систем. Следует учесть, однако, что в квантовой физике имеются и такие величины, как, например, спин и четность, которые вообще не имеют аналогов в классической физике.

**8.7. О связи математического аппарата квантовой механики с опытом и классической механикой.** Аксиоматическое определение связи операторов с измеряемыми значениями физических величин, постулирование вида самих операторов и основного уравнения квантовой механики, выполненные выше, в § 7 и 8, могут привести к представлениям о каком-то произволе в этой теории, отрыве ее исходных положений от эксперимента. На самом деле это не так: в квантовой механике отталкиваются от экспериментальных фактов, как и в других разделах физики, хотя связь между измерением и символом физической величины здесь не такая непосредственная, как в классической физике.

Обсудим математическую природу физических величин несколько подробнее. Физическая величина есть количественная характеристика свойств физического объекта. В простейшем случае физические свойства исчерпываются положительными действительными числами. Таковы, например, масса, длина, объем тела. Величины: температура, теплота, смещение по траектории и др.— принимают положительные и отрицательные значения. Имеются также величины (ускорение, скорость, сила и др.) — векторные, и для каждого значения такой величины нужно получить три измерения три числа.

Сказанное позволяет заключить, что различные свойства физических объектов отображаются различными математическими средствами. При этом известных нам средств, используемых в макромире — чисел, векторов, тензоров,— для описания микромира оказывается недостаточно, и на сцену выходят операторы, сопоставляемые физическим величинам. Ранее говорилось, что любое измерение в микромире производится макроскопическим прибором (см. § 4, п. 4) и приводит, как и в макромире, к некоторому действительному числу. Числа, полученные при измерениях, становятся конкретными значениями скалярных величин, проекциями векторов, собственными значениями операторов с помощью тех или иных формул.

Но не всякая величина, характеризующая микрочастицы, выражается опера-

тором. Запнсывая сами операторы, мы нспользуем некоторые значення фнзнческнх велнчнн, нграющнх роль параметров в решаемых задачах. Таковы масса, заряд, момент инерцни частнцы, фнзнческие постоянные — $c$, $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$, $h$ и др., входящие в формулы операторов. Этн же параметры входят в уравненне Шредингера и вытекающне из него соотношення. Перечнсленные сейчас велнчнны находятся экспернментально и нмеют определенные значення.

Особо следует остановнться на координатах точки пространства н момента временн, являющнхся аргументамн функцин состояння. Квантовая механнка пользуется общей с другнмн фундаментальнымн теорнямн моделью пространства — времени: пространство непрерывно, однородно, нзотропно, евклндово, время непрерывно н однородно (см. введенне, ч. I, § 2). Снстема отсчета в квантовой теорни ннерциальна. Это означает, что, задавая функцню состояння мнкрочастнцы, мы нсходнм из точных значений координат $x$, $y$, $z$ каждой точки пространства н момента времени $t$ (разумеется, в пределах достнгнутой прн измереннях точностн). Иными словамн, *координаты точки пространства* н *момента времени* в теории (нерелятнвнстской) имеют определенные значення.

Состояння с неопределенными значеннямн велнчнн обусловлены квантовым характером взанмодействня в микромнре и отражены в соотношениях неопределенностей (4.8), подтверждающнхся экспернментально (§ 4, п. 4). Мнкрочастнца не нмеет определенной координнаты в смысле воспронзводимостн ее значення прн повторенни нзмеренн, оказываясь каждый раз в разных точках пространства с координнатамн $x$, $y$, $z$. То же для нмпульса. Особенность координнат мнкрочастнцы н ее нмпульса как измеряемых нлн рассчнтываемых в теорин велнчнн н отражена в том, что им сопоставлены операторы, а не непосредственно чнсла. Теорня, следуя за опытом, не позволяет до опыта прнпнсать частнце какне-то конкретные значення координнат н нмпульса.

При всей кажущейся пронзвольностн выбора операторов $\hat{x}$ н $\hat{p}_x$ в аксноматнке (см. § 8) нх внд тесно связан с вероятностно-статнстнческой трактовкой $\psi$-функцни.

Еслн мы признаем, что координната мнкрочастицы прнннмает случайные значения, то положенне частнцы в пространстве определяется через плотность вероятностн:

$$w=\frac{dW}{dV},$$

являющуюся функцней координнат точкн пространства н опнсывающую механнческое состоянне частицы: $w(x, t)$ — разлнчна в разных снловых полях, для разных снстем н т. д.

Исходная и важнейшая аксиома квантовой механнкн состонт в том, что снловое поле, илн взаимодействне между частнцамн, определяет не функцню $w(x, y, z, t)$, а другую — $\psi(x, y, z, t)$, прнчем $w=\psi^*\psi$. Экспериментальное основанне аксиомы дают опыты по днфракцнн мнкрочастиц: днфракцнонная картнна соответствует ннтерференцни волн, а распределенне нитенснвностн пропорционально квадрату их амплитуды, т. е. велнчине $w=|\psi|^2$. С этнм обстоятельством (состояне задается не плотностью вероятностн, а $\psi$-функцией) связаны многне прнницнпнальные особенности квантовой механнкн.

Статнстнческое толкованне волновой функцнн в значительной мере предопределяет выбор оператора координнаты. Еслн предположнть, что поле (8.2) опнсывает состояння с определенным нмпульсом, то далее из тех же соображений находнтся н оператор нмпульса.

Очень важно для понимання многих вопросов усвонть, что благодаря соотношенню неопределенностей нмпульс не определяется, как это было в макроскопической фнзнке, через пронзводную от координаты, т. е. через скорость. Формула $p_x=m\dot{x}$ не нмеет места, потому что нет кннематнческого уравнення двнженя: $x=f(t)$. Отсюда следует, что измеренне импульса в мнкромнре не может производнться через нзмеренне скоростн, а должно выполняться другимн, незавнснмыми от нзмерення координнаты способами, напрнмер через связь нмпульса с энергней, с помощью закона сохранення нмпульса н т. д. (Что касается координнаты точкн пространства, то ее нзмеренне в мнкромнре не пересматрнвается.)

Сказанное выше о координнате н нмпульсе позволяет сделать вывод об особой

ролн координат н импульса как независимых переменных при описании состояний микрочастиц. В нашем курсе функции состояний задаются в обычном пространстве с координатами $x$, $y$, $z$. Однако возможно их определение и в пространстве импульсов с координатами $p_x$, $p_y$, $p_z$ (см. приложение III).

Выбор вида операторов других величин производится с помощью принципа соответствия. Предполагается, что в некотором предельном случае законы квантовой механики допускают переход к законам классической механики. Сами классические величины, такие, как энергия и момент импульса, есть не что иное, как средние значения соответствующих квантово-механических величин. Принцип соответствия требует того, чтобы связи между средними значениями квантово-механических величин совпадали с известными классическими соотношениями. Отсюда следует, что формулы, связывающие операторы соответствующих величин, повторяют классические формулы (об этом подробнее говорится в § 9).

Таким образом, все величины, которые выражаются в классике через координаты и импульсы, оказываются операторами, причем вид их легко устанавливается (см. § 8, п. 2).

В нашем курсе особняком стоит одна величина — спин микрочастицы. Он не связан с функцией состояния, не входит в уравнение Шредингера (до § 13, п. 3). Поэтому спин мы должны рассматривать как параметр микрочастицы, подобный ее массе и заряду. В более полной релятивистской теории спин определяется по функции состояния действием на нее оператора спина (см. § 13, пп. 3 и 4). Ситуация со спином позволяет понять, что существуют величины, которые в нерелятивистской теории выступают как параметры, а в релятивистской являются операторами, не содержащими координат и импульсов. К ним, например, относится оператор электрического заряда, других зарядов. Но эти операторы выходят за рамки данного пособия.

Классическая механика есть предельный случай квантовой механики (см. § 9, п. 2). В то же время, учитывая роль классической физики при введении исходных положений квантовой механики, можно заключить, что обе теории имеют особую связь друг с другом. Обратим внимание на то, что все измерения производятся макроскопическими приборами, далее, существен принцип соответствия при определении вида силовых полей (операторы $U(\vec{r})$) и операторов ряда величин, таких, как $\hat{T}$, $\hat{L}$, $\hat{H}$.

Что касается основного уравнения квантовой механики — уравнения Шредингера, то оно обладает большей общностью, нежели основные уравнения классической механики — уравнения Ньютона, Лагранжа, Гамильтона. Однако есть связь уравнения Шредингера с классической физикой: во-первых, через историю открытия, а во-вторых, переходом к классическим уравнениям (см. § 9).

**8.8. К вопросу о размерностях в квантовой механике.** Кратко остановимся на вопросе о размерностях величин и операторов. Известно, что каждая физическая величина может быть выражена классическими формулами через другие величины. Связь величины с основными величинами — длиной, массой, временем — выражают формулы размерности.

Но оператор обозначает действие на функцию, а не непосредственно на величину; поэтому неочевидно, какое отношение к нему имеет размерность. Однако если вспомнить уравнение (7.5) для собственных значений и собственных функций оператора, то из него видно, что размерность оператора должна совпадать с размерностью его собственных значений.

Так, например, для оператора импульса имеем

$$\hat{p}_x\psi = p_x\psi,$$

т. е.

$$[\hat{p}_x] = MLT^{-1}.$$

В самом деле, используя явный вид оператора:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

и вспоминая, что постоянная $\hbar$ имеет размерность энергии, умноженной на время, убеждаемся в справедливости сказанного.

Совпадают размерности правой и левой частей уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi,$$

если учесть, что оператор $\widehat{H}$ имеет размерность энергии. Что же касается размерности функции состояния, то она видна из исходного определения вероятности (2.1):

$$dW = |\psi|^2 dV.$$

Так как вероятность — величина безразмерная, то размерность $\psi$-функции — обратная величина корня квадратного из объема:

$$[\psi] = L^{-\frac{3}{2}}.$$

Например, в одномерном случае потенциальной ямы размерность найденной ранее функции состояний (5.7) определялась нормировочным коэффициентом: $C_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$, $[\psi] = L^{-\frac{1}{2}}$.

Такая же размерность у функций состояния квантового осциллятора (см. формулу (6.17)). В случае свободной частицы функция состояния (3.22) имеет неопределенный коэффициент $C$, которому следует приписать размерность: $[C] = L^{-\frac{3}{2}}$.

Как правило, размерность $\psi$-функции и определяется ее нормировочным множителем; без него $\psi$-функция в процессе решения уравнения Шредингера часто оказывается безразмерной. Постоянный ее сомножитель определяется условием нормировки (2.5):

$$|N|^2 \int \tilde{\psi}^* \tilde{\psi}\, dV = 1.$$

Из этого же условия получается указанная выше размерность:

$$|N|^2 = L^{-3}.$$

## § 9. ИЗМЕНЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН СО ВРЕМЕНЕМ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

**9.1. Изменение средних значений физических величин со временем.** Из классической механики известно, какое важное значение имеют в ней законы изменения величины с течением времени. Достаточно напомнить формулу (см. ч. I, (9.1))

$$\frac{d\vec{p}}{dt}=\vec{F},$$

выражающую основное уравнение динамики материальной точки, или формулы (см. ч. I, (10.4), (12.1))

$$\frac{d}{dt}\vec{L}=\vec{M},\ \frac{d}{dt}T=\vec{v}\vec{F},$$

дающие законы изменения момента импульса и кинетической энергии.

Естествен вопрос об описании изменений с течением времени физических величин в микромире. Поскольку в общем случае величина не имеет определенного значения, следует обратиться к ее среднему значению. Среднее значение величины зависит от времени, если состояние системы нестационарно или если в ее оператор входит время. Это видно из формулы (8.7)

$$\bar{a}(t)=\int \psi^*(x,\ t)\,\hat{A}(x,\ t)\,\psi(x,\ t)\,dx,$$

где в обозначениях показана зависимость от времени оператора и волновой функции.

Найдем полную производную от $\bar{a}$ по $t$:

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi+\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi+\psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx. \tag{9.1}$$

Из уравнения Шредингера (8.3) следует, что

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\psi)^*,\ \frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi.$$

После подстановки выражений для производных от функции состояния в формулу (9.1) имеем

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi dx+\frac{i}{\hbar}\int\{(\hat{H}\psi)^*\hat{A}\psi-\psi^*\hat{A}\hat{H}\psi\}\,dx. \tag{9.2}$$

Оператор $\hat{H}$ является самосопряженным. Поэтому

$$\int(\hat{A}\psi)(\hat{H}\psi)^*\,dx=\int\psi^*\hat{H}(\hat{A}\psi)\,dx,$$

и выражение (9.2) принимает окончательный вид

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int\psi^*\left\{\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\ \hat{A}]\right\}\psi dx \tag{9.3}$$

Найденное соотношение решает вопрос об изменении средних значений физических величин со временем. Из него, в частности, вытекает, что среднее значение постоянно, если равен нулю оператор:

$$\hat{\dot{A}}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\ \hat{A}]. \tag{9.4}$$

При независящем от времени операторе $\hat{A}$ для сохранения величины достаточно, чтобы операторы $\hat{H}$ и $\hat{A}$ коммутировали. По-

скольку оператор $\widehat{H}$ коммутирует сам с собой, то для сохранения средней энергии необходимо, чтобы $\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t}=0$. Это выполняется в постоянных силовых полях.

Оператор (9.4) называется оператором *производной физической величины* по времени, что подчеркнуто в его обозначении.

Операторная формула (9.4) и выражает закон изменения величины во времени. Располагая оператором некоторой физической величины $\widehat{A}$ и функцией состояния системы $\psi$, можно вычислить производную от среднего значения этой величины, воспользовавшись оператором $\dot{\hat{A}}$:

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int \psi^* \dot{\hat{A}} \psi dx. \tag{9.5}$$

Подведем итог. Для определения характера изменения физической величины с течением времени нужно построить, используя оператор Гамильтона и оператор данной величины, оператор производной, а для него найти среднее в соответствующем состоянии.

Характерно, что в квантовой механике исходными для всей теории были операторы импульса и координаты, отнюдь не связанные между собой классическим соотношением $\vec{p}=m\dot{\vec{r}}$. Располагая теперь правилом для построения операторов производных величин, нетрудно найти оператор $\dot{\hat{r}}$, который можно назвать скоростью, а оператор $\ddot{\hat{r}}$ — ускорением. Однако они определяются через оператор Гамильтона, а не непосредственным дифференцированием (практического значения в квантовой механике не имеют).

**9.2. Уравнения движения в форме Гейзенберга.** Формула (9.3) или эквивалентное ей операторное соотношение (9.4) выражают на математическом языке изменение физических величин — динамических переменных — со временем, и поэтому они называются *квантовыми уравнениями движения*. Если операторы физических величин не содержат времени, то равенство (9.4) принимает вид

$$\dot{\hat{A}}=\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{A}]. \tag{9.6}$$

Оно называется уравнением движения в форме Гейзенберга и может быть положено в основу квантовой механики при другой схеме ее изложения вместо уравнения Шредингера (см. приложение III).

Чтобы раскрыть смысл уравнений (9.6), запишем их для важнейших операторов координаты и импульса (для простоты возьмем одно измерение):

$$\dot{\hat{x}}=\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \hat{x}], \tag{9.7}$$

$$\dot{\hat{p}}=\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \hat{p}_x]. \tag{9.8}$$

Полученные уравнения могут быть сопоставлены с классическими

уравнениями Гамильтона (см. ч. I, § 23, п. 3) — они называются квантовыми уравнениями Гамильтона. Поскольку в них фигурируют операторы, то для перехода к измеримым средним значениям физических величин $\dot{\bar{x}}$ и $\dot{\bar{p}}_x$ необходимо располагать конкретной функцией состояния и оператором Гамильтона.

Рассмотрим для примера движение микрочастицы в силовом поле $U(x, y, z)$. Как известно,

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U(x, y, z).$$

Подставим этот гамильтониан в (9.7). Операторы $U(x, y, z)$, $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ и $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ коммутируют с оператором координаты $\hat{x}$. Поэтому нужно вычислить только коммутатор $\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]$:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]\varphi=\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\varphi)-x\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}=2\frac{\partial}{\partial x}\varphi,$$

или

$$[\hat{H}, \hat{x}]=-\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}=-\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x.$$

Согласно уравнению (9.7) имеем окончательно

$$\hat{\dot{x}}=\frac{1}{m}\hat{p}_x. \tag{9.9}$$

Смысл соотношения (9.9) ясен: средняя скорость микрочастицы определяется отношением ее среднего импульса к массе, т. е. формула дает классическое определение импульса через скорость для средних значений.

Для раскрытия уравнения (9.8) представим оператор Гамильтона в виде

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)+U(x, y, z).$$

Оператор $p_x$ коммутирует с первым слагаемым — оператором кинетической энергии — и не коммутирует со вторым слагаемым — оператором потенциальной энергии:

$$[\hat{U}, \hat{p}_x]\varphi=-i\hbar\left(U\frac{\partial\varphi}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}(U\varphi)\right)=i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\varphi.$$

Поэтому

$$[\hat{H}, \hat{p}_x]=i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Из уравнения (9.8) вытекает

$$\hat{\dot{p}}_x=-\frac{\partial U}{\partial x}. \tag{9.10}$$

Точно так же можно показать, что в трехмерном случае

$$\dot{\hat{p}} = -\nabla U, \tag{9.11}$$

что соответствует второму закону Ньютона в операторной форме.

Итак, квантовые уравнения движения для координат и импульса привели нас к операторной форме основного уравнения динамики. Это одно из проявлений принципа соответствия: связь между операторами такая же, как между величинами в классической механике.

**9.3. Уравнения Эренфеста. Переход от квантовых соотношений к классическим.** Воспользуемся теперь найденными правилами вычисления производной по времени от среднего значения координаты и импульса. Согласно формулам (9.9) и (9.10) имеем

$$\dot{\bar{x}} = \frac{1}{m}\bar{p}_x, \tag{9.12}$$

$$\dot{\bar{p}}_x = -\frac{\overline{\partial U}}{\partial x}. \tag{9.13}$$

Соотношения (9.12) и (9.13) носят название теорем Эренфеста. Из них вытекает уравнение Ньютона для микрочастиц:

$$m\ddot{\bar{x}} = -\frac{\overline{\partial U}}{\partial x} = \bar{F}_x, \tag{9.14}$$

где $F_x$ — проекция силы, действующей на частицу. Это некоторая функция координат точки пространства.

Если мы захотим практически использовать уравнение (9.14), то потребуется по заданной функции $U(x, y, z)$ найти среднее значение силы в некотором состоянии $\psi$. После этого должно определиться среднее значение ускорения, а по нему можно будет судить о кинематике некоторого среднего движения микрочастицы в силовом поле. Но этот путь непосредственно для описания движения микрочастицы не применяется. Дело в том, что в практически важных и интересных случаях состояний микрочастицы (стационарное состояние) среднее значение координаты частицы от времени не зависит, а уравнение (9.14) информации о движении не содержит. Смысл уравнения в другом: оно устанавливает связь между квантовым и классическим описаниями движения и соответствующими уравнениями.

Пример 9.1. **Использование теорем Эренфеста.**

Рассмотрим переход от квантового уравнения (9.14) к основному закону классической механики в случаях, когда средние значения имеют смысл. Для этого представим себе, что волновая функция заметно отлична от нуля лишь в малой области пространства $\Delta x$. Как известно из § 4, п. 2, такое состояние описывается волновым пакетом. Значение $x$ можно принять равным координате середины пакета. Если $\Delta x$ мало, то

$$\bar{F}_x(x) \simeq F_x(\bar{x}). \tag{9.15}$$

Поскольку сила определяется градиентом потенциальной энергии, равенство (9.15) выполняется с достаточной точностью только в медленно и плавно изменяющихся полях. Наш случай тоже относится к плавным полям.

Если учесть соотношение (9.15), то на основании формулы (9.14) имеем

$$m\ddot{\bar{x}} = F_x(\bar{x}).$$

Это по форме уже классическое соотношение, так как при малом $\Delta x$ пакет можно сопоставить материальной точке. Однако условие (9.15) еще недостаточно для перехода к классической механике, так как частица должна иметь определенный импульс.

Пакет образуется набором монохроматических волн с импульсами, лежащими в интервале $\bar{p} \pm \Delta p$. Если

$$\Delta p \ll \bar{p}, \tag{9.16}$$

то можно положить $p \approx \bar{p}$. Условие (9.16) заведомо выполняется, если кинетическая энергия достаточно велика, так как правую часть равенства можно сделать сколь угодно большой, увеличивая энергию частицы.

Таким образом, квантовое движение приобретает классические черты при переходе к большим энергиям в плавно изменяющихся силовых полях.

Вопрос разобран еще не до конца. С течением времени пакет расплывается, $\Delta x$ растет и, вообще говоря, соответствие классической картине движения теряется.

Можно показать, что время, за которое ширина пакета удваивается, по порядку величины равно:

$$t \approx \frac{m(\Delta x)^2}{\hbar}, \tag{9.17}$$

где при вычислении нужно взять начальное значение $\Delta x$. Для частиц атомных размеров масса $m \sim 10^{-27}$ кг, $\Delta x \sim 10^{-10}$ м и формула (9.17) дает $t \sim 10^{-13}$ с. В газе при нормальных условиях среднее время свободного пробега $\sim 10^{-10}$ с, поэтому представление о молекулах газа как о классических корпускулах, вообще говоря, является неправомерным. Из соотношения (9.17) следует, что переход к классической механике есть переход к частицам достаточно большой массы.

**9.4. Законы сохранения физических величин в квантовой механике.** Как и в других разделах физики, в квантовой механике важнейшее значение имеют законы сохранения ряда динамических величин, характеризующих состояние микрочастицы или системы микрочастиц и изменение этого состояния. Таковы законы сохранения *энергии*, *импульса*, *момента импульса* — величин, имеющих универсальное применение во всей физике. В микромире к ним добавляется закон сохранения *четности* — величины, специфической для квантовой физики (и ряд других — см. [19]).

В классической механике и электродинамике законы сохранения получают, преобразуя основные уравнения теории — уравнения Ньютона, Максвелла. Из них получают законы изменения с течением времени импульса, момента импульса, энергии, а затем рассматривают специальные условия, при которых данные величины не изменяются во времени, т. е. сохраняются. Этими условиями служат замкнутость и изолированность изучаемой системы: в механике — тел, в электродинамике — поля и заряженных тел.

Аналогичен подход к законам сохранения во времени и в квантовой механике. Уравнение Шредингера привело нас к формуле (9.4) для оператора производной физической величины по времени:

$$\dot{\hat{A}} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}].$$

Применяя его для вычисления производной по времени от среднего значения величины, заключаем, что при условии $\hat{A} = 0$, $\bar{a} = \text{const}$, среднее значение физической величины сохраняется во времени.

Рассмотрим условия сохранения определенного значения физической величины. Если функция состояния $\psi$, в котором находится система, совпадает с собственной функцией $\varphi_i$ оператора $\hat{A}$, то величина имеет определенное значение: $a_i$. Из формулы для среднего (8.7) в этом случае получаем $\bar{a}=a_i$. Если, кроме того, оператор (9.4) равен нулю, то определенное значение сохраняется. (Величина $a_i$ является интегралом движения.)

Закон сохранения энергии. Оператор Гамильтона может зависеть от времени, но может и не зависеть от него. Во всех решенных ранее задачах встречались стационарные поля, для них $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$. Кроме того, очевидно, что $[\hat{H}, \hat{H}]=0$. Следовательно, $\dot{\hat{H}}=0$, а $\bar{E}=\text{const}$.

Если функция состояния системы в стационарном поле собственная для оператора Гамильтона, то энергия имеет определенное сохраняющееся значение. О таких состояниях уже говорилось ранее как о *стационарных*.

*Энергия микрочастицы в стационарном поле сохраняется.*

Понятно также, что оператор Гамильтона для свободной частицы не содержит времени: энергия свободной частицы — величина постоянная. Осталось рассмотреть весьма важный случай замкнутой системы частиц. Замкнутость означает учет всех взаимодействующих частиц, т. е. потенциальная энергия зависит от расстояний между ними (см. ч. I, § 14, п. 6), гамильтониан системы не содержит времени. Поэтому энергия замкнутой системы микрочастиц сохраняется.

Закон сохранения импульса. Оператор импульса частицы: $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$ — не содержит времени и коммутирует с оператором Гамильтона для свободной частицы: $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. Следовательно, *импульс свободной микрочастицы сохраняется.*

Если частица находится в силовом поле, то оператор Гамильтона содержит координаты, на которые действует оператор импульса, т. е. $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$ не коммутируют в общем случае. В силовом поле импульс не сохраняется.

Для замкнутой системы частиц доказывается (см. § 9, п. 6), что оператор импульса коммутирует с оператором Гамильтона — *импульс замкнутой системы микрочастиц сохраняется.*

Закон сохранения момента импульса. Оператор момента импульса для частицы:

$$\hat{\vec{L}}=-i\hbar[\vec{r}\nabla]$$

не содержит времени и коммутирует с оператором Гамильтона свободной частицы. Следовательно, *момент импульса свободной частицы сохраняется* (т. е. существуют состояния, в которых он постоянен наряду с энергией).

В общем случае в силовом поле момент импульса не сохраняется,

однако, как и в классической механике, здесь имеют место важные частные случаи. В центрально-симметричном поле, например, момент сохраняется. (Особенности квантового случая по сравнению с классическим рассматриваются ниже, в главе IV.)

Оператор момента импульса для системы частиц коммутирует с оператором Гамильтона для замкнутой системы, поэтому *момент импульса замкнутой системы микрочастиц сохраняется* (см. § 9, п. 6).

Итак, законы сохранения энергии, импульса, момента импульса в квантовой механике по форме и содержанию аналогичны классическим.

**9.5. Связь законов сохранения с инвариантностью оператора Гамильтона относительно преобразований симметрии.** Покажем, что законы сохранения физических величин связаны со свойствами симметрии пространства и времени. Здесь и далее *под симметрией понимается неизменность свойств пространства при сдвигах, поворотах, отражениях, приводящая к инвариантности некоторых величин и выражений относительно соответствующих преобразований координат.*

В основном уравнении квантовой механики — уравнении Шредингера — система представлена через оператор Гамильтона. Поэтому симметрия системы проявляется в инвариантности гамильтониана относительно каких-либо преобразований координат и времени.

Рассмотрим некоторое преобразование координат:

$$\vec{r}\to\vec{r}', \tag{9.18}$$

выражающее либо перемещение системы как целого в пространстве — сдвиг, либо поворот, либо отражение в зеркале. Его удобно записать на операторном языке так:

$$\vec{r}'=\hat{S}\vec{r}. \tag{9.19}$$

Обратное преобразование выражается оператором $\hat{S}^{-1}$. Последнее означает, что

$$\vec{r}=\hat{S}^{-1}\vec{r}'.$$

Пусть состояние системы описывалось до перемещения функцией $\psi(\vec{r})$. Произведем преобразование (9.19), которое изменит и $\vec{r}$, и вид $\psi$. Но если существует соответствующая симметрия пространства, то в точку $\vec{r}'$ перейдет значение волновой функции, ранее бывшее в точке $\vec{r}$. Поэтому новая волновая функция $f(\vec{r}')$ удовлетворяет равенству

$$f(\vec{r}')=f(\hat{S}\vec{r})=\psi(\vec{r}). \tag{9.20}$$

Введем оператор $\hat{R}$, изменяющий вид функции в рассматриваемом преобразовании:

$$\hat{R}\psi(\vec{r})=f(\vec{r}), \tag{9.21}$$

где $\hat{R}$ может быть оператором преобразования для сдвига, поворота и отражения системы в зеркале.

Докажем, что если гамильтониан инвариантен относительно преобразования (9.19), то оператор $\hat{R}$ коммутирует с оператором Гамильтона. Согласно формулам (9.20) и (9.21)

$$\hat{R}\psi(\vec{r})=\psi(\hat{S}^{-1}\vec{r}). \tag{9.22}$$

Введем обозначение $\vec{r}''=\hat{S}^{-1}\vec{r}$ для результата преобразования в равенстве (9.22). Тогда для произвольной функции $\varphi$ имеем

$$(\hat{R}\hat{H})\varphi=\hat{R}(\hat{H}\varphi)=\hat{H}(\vec{r}'')\varphi(\vec{r}''),$$
$$(\hat{H}\hat{R})\varphi=\hat{H}(\hat{R}\varphi)=\hat{H}(\vec{r})\varphi(\vec{r}'').$$

Если $\hat{H}(\vec{r})=\hat{H}(\vec{r}'')$, т. е. преобразование $\hat{S}$ не изменяет гамильтониан, то правые части равенств совпадают. Следовательно, $\hat{R}\hat{H}=\hat{H}\hat{R}$. Утверждение доказано.

Если оператор физической величины не зависит от времени и коммутирует с гамильтонианом, то эта физическая величина сохраняется. Коммутативность операторов $\hat{R}$ и $\hat{H}$ означает наличие закона сохранения величины $R$. Чтобы указать ее физический смысл, нужно задать явный вид оператора $\hat{R}$.

Во многих случаях конечное преобразование координат можно представить как совокупность последовательных бесконечно малых преобразований. Рассмотрим, например, бесконечно малый сдвиг — трансляцию системы в пространстве:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r}.$$

Обратное преобразование:

$$\vec{r} = \vec{r}' - \delta\vec{r}.$$

С точностью до членов второго порядка малости:

$$\psi(\hat{S}^{-1}\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) - \delta\vec{r}\nabla\psi.$$

Согласно соотношению (9.22)

$$\hat{R}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - \delta\vec{r}\nabla\psi.$$

Отсюда

$$\hat{R} = 1 - \delta\vec{r}\nabla.$$

Это оператор бесконечно малого смещения (сдвига или трансляции) в пространстве.

**9.6. Связь законов сохранения импульса, момента импульса и энергии со свойствами пространства и времени.** Пусть преобразование координат есть сдвиг на отрезок $\vec{a}$:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}. \tag{9.23}$$

Вследствие однородности пространства состояние замкнутой системы не должно изменяться при сдвиге. Это обусловливает выполнение равенства (9.20).

Как будет показано в дальнейшем, оператор Гамильтона для системы частиц имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m_i} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N), \tag{9.24}$$

где $\hat{\vec{p}}_i$ — операторы импульсов отдельных частиц, $\vec{p}_i = -i\hbar\nabla_i$, $\nabla_i = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x_i} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y_i} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z_i}$, а $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N)$ — потенциальная энергия их взаимодействия. Все известные типы взаимодействия между частицами таковы, что потенциальная энергия зависит только от расстояния между частицами. Поэтому оператор (9.24) не меняет вида, если сделать замену переменных (9.23).

Оператор бесконечно малого смещения $\hat{R}$ в данном случае имеет вид

$$\hat{R} = 1 - \delta\vec{a}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a}\hat{\vec{p}},$$

где

$$\hat{\vec{p}} = \sum_{i=1}^{N}\hat{\vec{p}}_i \tag{9.25}$$

— оператор импульса системы.

Из коммутативности оператора импульса (9.25) с оператором Гамильтона (9.24) следует закон сохранения импульса замкнутой системы.

Может показаться, что операторы $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$ не коммутируют вследствие наличия в гамильтониане слагаемого, соответствующего потенциальной энергии. Но это не так. Для системы из двух частиц $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(r)$, где $r = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$. Найдем коммутатор $[\hat{p}_x, U]$:

$$[p_x, U]\varphi = -i\hbar\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2}\right), U\right]\varphi = -i\hbar\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2}\right)U\varphi - U\left(\frac{\partial\varphi_1}{\partial x_1} + \frac{\partial\varphi}{\partial x_2}\right)\right\} = -i\hbar\frac{dU}{dr}\left(\frac{\partial r}{\partial x_1} + \frac{\partial r}{\partial x_2}\right)\varphi.$$

В результате получаем нуль, так как $-\frac{\partial r}{\partial x_1}=\frac{\partial r}{\partial x_2}$.

Вывод закона сохранения импульса с учетом однородности пространства раскрывает в определенном отношении природу импульса: импульс можно ввести как величину, сохраняющуюся в силу однородности пространства.

При повороте системы вокруг некоторой оси на бесконечно малый угол $\delta\varphi$ всякая точка смещается на отрезок

$$\delta\vec{r}=[\delta\vec{\varphi}\vec{r}].$$

В этом случае

$$\hat{R}=1-[\delta\vec{\varphi}\vec{r}]\,\nabla.$$

Используя свойства смешанного произведения векторов, получаем

$$\hat{R}=1-\delta\vec{\varphi}\,[\vec{r}\nabla]=1-\frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\hat{\vec{L}},$$

где $\hat{\vec{L}}$ — оператор момента импульса частицы.

Состояние замкнутой системы, а значит, и ее гамильтониан не изменяются при поворотах вокруг оси вследствие изотропии пространства; следовательно, оператор $\hat{R}$ коммутирует с $\hat{H}$, что приводит к коммутации $\hat{\vec{L}}$ и $\hat{H}$. Отсюда вытекает закон сохранения момента импульса.

Математическая сторона вопроса о наличии интегралов движения мало изменится, если вместо координат речь пойдет о каком-нибудь параметре, входящем в гамильтониан. В частности, таким параметром является время.

Введем оператор $\hat{\tau}$ смещения во времени на интервал $\tau$:

$$t'=\hat{\tau}t=t+\tau.$$

Оператор, действующий на функцию $\psi$ при сдвиге во времени, обозначим через $\hat{T}$. В соответствии с выражением (9.22) имеем

$$\hat{T}\psi=\psi(t-\tau).$$

Найдем конкретный вид оператора $\hat{T}$ для сдвига на бесконечно малый промежуток времени $\delta\tau$:

$$\hat{T}=1-\delta\tau\frac{\partial}{\partial t}.$$

Если воспользоваться уравнением Шредингера (8.3), то можно выразить из него оператор $\frac{\partial}{\partial t}$, после чего получим

$$\hat{T}=1+\frac{i}{\hbar}\,\delta\tau\hat{H}.$$

Если оператор $\hat{H}$ не зависит от времени, то операторы $\hat{T}$ и $\hat{H}$ коммутируют. Для замкнутой системы оператор Гамильтона не зависит от времени, энергия сохраняется.

Существенно, что энергия как физическая величина связана с однородностью времени, ибо ее сохранение обусловлено однородностью времени.

**9.7. Четность и закон сохранения четности.** Кроме однородности и изотропности, имеется еще один вид симметрии пространства; соответствующую ему операцию нельзя свести к совокупности бесконечно малых преобразований координат. Речь идет об операции *инверсии*, заключающейся в изменении знака всех трех координат $x$, $y$ и $z$:

$$\vec{r}\to\vec{r}'=-\vec{r}, \tag{9.26}$$

или

$$x'=-x,\ y'=-y,\ z'=-z.$$

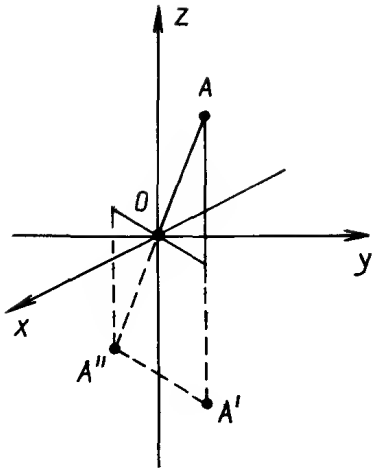



Рис 9 1

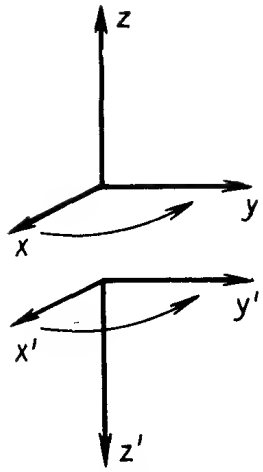



Рис 9 2.

Операцию инверсии можно провести в два этапа, комбинируя отражение в зеркале и поворот на угол 180°. На рисунке 9.1 точка $A$ при отражении в зеркале, поверхность которого совпадает с плоскостью $xOy$, переходит в точку $A'$. Если совершить еще и поворот вокруг оси $Oz$, то точка $A'$ совместится с точкой $A''$, координаты которой связаны с координатами точки $A$ преобразованием инверсии. Поэтому симметрия систем относительно инверсии непосредственно связана с симметрией относительно отражения в зеркале — с симметрией «правого» и «левого».

Всякое преобразование координат можно трактовать двояко: как следствие перемещения системы (при неизменных осях координат) и как следствие изменения положения осей координат (при этом физическая система остается неподвижной). До сих пор мы использовали только первый способ. Однако второй способ эквивалентен первому. При нем преобразование (9.26) рассматривается как изменение направления осей координат: правая декартова система координат переходит в левую. Это показано на рисунке 9.2.

Предположим, что состояние физической системы не изменяется при инверсии. Пусть до преобразования она описывалась волновой функцией $\psi(\vec{r})$. Волновая функция $f(\vec{r}')$, описывающая систему после преобразования, должна удовлетворять равенству

$$\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}') = f(-\vec{r}). \tag{9.27}$$

Введем оператор, изменяющий вид функции при изменении знака у координат, и назовем его оператором инверсии:

$$\widehat{P}\psi(\vec{r}) = f(\vec{r})$$

Согласно равенству (9.27) имеем

$$\widehat{P}\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}). \tag{9.28}$$

Если оператор $\widehat{P}$ коммутирует с гамильтонианом, то существует

закон сохранения некоторой физической величины, которая получила название *четность*. Для указанной коммутации оператор Гамильтона системы должен быть инвариантным относительно инверсии координат, а это его свойство вытекает из предположения, что состояние физической системы не изменяется при инверсии.

Для определения допустимых значений четности запишем уравнение для собственных функций и собственных значений оператора инверсии:

$$\hat{P}\varphi(\vec{r}) = p\varphi(\vec{r}) \tag{9.29}$$

Применяя оператор $\hat{P}$ к обеим частям соотношения (9.29), получим

$$\hat{P}^2\varphi(\vec{r}) = p^2\varphi(\vec{r}). \tag{9.30}$$

Но согласно определению оператора инверсии (9.28) последовательное применение его к любой функции дважды даст исходную функцию:

$$\hat{P}(\hat{P}\varphi(\vec{r})) = \hat{P}\varphi(-\vec{r}) = \varphi(\vec{r}). \tag{9.31}$$

Сравнивая уравнения (9.30) и (9.31), находим, что $p^2 = 1$, а $p = \pm 1$ — собственные значения оператора инверсии: $+1$ и $-1$. *Эти два числа и принимаются за значения новой физической величины — четности состояния микрочастицы или системы микрочастиц.*

Если функция состояния не изменяется при инверсии осей, то состояние четное, а четность равна $+1$; если изменяет знак — нечетное, четность $-1$.

В отличие от аддитивных сохраняющихся величин, рассмотренных ранее, четность — величина мультипликативная, т. е. четность системы равна произведению четностей ее частей. Это становится понятным, если, забегая вперед, сообщить, что функция состояния системы невзаимодействующих частиц равна произведению одночастичных функций:

$$\psi(x_1, x_2) = \varphi_1(x_1)\,\varphi_2(x_2).$$

Если $\hat{P}$ и $\hat{H}$ коммутируют, то существуют состояния с определенной энергией и определенной четностью. В качестве примера укажем на найденные ранее состояния гармонического осциллятора и частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками: четность стационарных состояний имеет определенное, не изменяющееся во времени значение — плюс или минус единица.

Все гамильтонианы электромагнитных взаимодействий не изменяются при пространственной инверсии, поэтому справедлив закон сохранения четности замкнутой системы при электромагнитных взаимодействиях в ней.

Мы рассмотрели четность состояния микрочастиц, обусловленную пространственным движением, описываемым волновой функцией. Однако результаты анализа многочисленных экспериментов — реакций с элементарными частицами — на основании закона сохранения четности заставляют приписывать элементарным частицам

собственные (внутренние)' значения четности, не связанные с движением частиц в пространстве. Так, например, электронам, нейтронам, протонам следует приписать внутреннюю четность $+1$, а пи-мезонам и позитронам — четность $-1$. Фотоны же могут иметь ту и другую четность.

В классической физике понятие о четности состояния не рассматривается в связи с тем, что изменение направления осей координат не приводит в силу применяемого там способа описания движений и взаимодействий к новой сохраняющейся величине. В кваитовой механике понятие о четности возникает в связи с описанием состояния с помощью $\psi$-функции, а закон сохранения четности наряду с законами сохранения энергии, импульса, момента импульса оказывается связанным с фундаментальными свойствами пространства.

Рассматривая условный выбор либо «правой», либо «левой» систем, нет никаких оснований ожидать, что от этого выбора могут зависеть свойства изучаемых физических объектов — замкнутых систем микрочастиц. Однако возможен и другой взгляд на преобразования инверсии: можно предположить, что существуют два вида пространства — «правое» и «левое», не эквивалентные друг другу; связь между ними отражена в формулах инверсии осей координат. В таком случае гамильтонианы необязательно коммутируют с оператором инверсии и четность может не сохраняться. В 1956 г. было обнаружено, что процессы распада ядер и элементарных частиц, происходящие за счет слабого взаимодействия, происходят с нарушением закона сохранения четности. В настоящее время экспериментально подтверждено, что четность сохраняется в электромагнитных и сильных взаимодействиях и не сохраняется в слабых. Но до сих пор не вполне ясно, обусловлено ли нарушение закона сохранения четности только фундаментальными свойствами пространства и времени или связано с другими причинами.

### Методические указания и рекомендации

**1.** В третьей главе объединены, по существу, два различных вопроса: математический аппарат и общие теоремы квантовой механики, изложенные на его основе.

По теории операторов кратко сообщаются самые необходимые сведения. Их можно при желании расширить, пользуясь литературой (например, [3], [5], [11]).

Важную роль играют аксиомы или постулаты квантовой механики, так как они устанавливают соответствие между идеальными математическими и реальными физическими объектами — функциями и операторами, с одной стороны, и системами микрочастиц, измеримыми величинами, физическими явлениями — с другой. Необходимо подчеркнуть модельный характер применяемых для математического описания реальных систем функций состояния, операторов величин и разобрать отображение реальных объектов на математические.

Непосредственная связь физической величины с числовым

множеством значений ее в классической физике нередко приводит к отождествлению физического свойства с количественной характеристикой. Отсутствие прямой связи между числом и величиной в квантовой механике может быть понято только при углублении общего понятия о физической величине.

Операторы координаты и импульса постулированы. Это сделано с целью упрощения и придания важному материалу необходимой для первоначального изучения вопроса компактности. Однако обращаем внимание лектора и читателя на возможное обоснование выбора этих операторов, связанное с толкованием $\psi$-функции и определением среднего (см. пример 8.9).

Следует иметь в виду, что в главе не помещены все сведения по математическому аппарату, нужному для изучения программного материала: изложение стало бы слишком тяжеловесным и оторванным от физического содержания. Поэтому некоторые математические вопросы рассматриваются далее в курсе по мере необходимости, а в третьей главе аппарат применяется для изучения законов изменения и сохранения величин с течением времени. Помимо прикладного предназначения математические вопросы весьма содержательны в познавательном отношении. Установить возможно полнее связь классической механики с квантовой — значит прояснить много трудных мест квантовой механики, углубить понимание исходных принципов всей физики.

Законы сохранения изложены в связи со свойствами пространства и времени. Такой подход (углубленный уровень) осуществлялся в рамках лагранжева формализма в классической механике (см. ч. I, § 23). В квантовой механике с помощью операторов изложение особенно лаконично. Однако и здесь § 9, пп. 5 и 6 относятся к углубленному уровню.

**II.** При изучении материала рекомендуется иллюстрировать теоретические положения примерами, опираясь на конкретный материал второй главы (некоторые примеры даны в тексте). Студентам полезно самим составлять примеры. Для успешного усвоения материала надо выполнить и упражнение к главе.

Полезно проконтролировать усвоение в поиске ответов на следующие вопросы:

— Дайте определение ортонормированной системы функций. Определите $\delta$-функцию и назовите ее основные свойства. Укажите правило вычисления коэффициентов Фурье. Дайте определение оператора, линейности операторов, самосопряженности. Приведите примеры сложения и умножения операторов. Запишите операторное уравнение для собственных функций и назовите все входящие в него математические символы. Дайте определение собственной функции оператора, собственного значения. Приведите примеры собственных функций и собственных значений. Сформулируйте (и выпишите вместе) постулаты, связывающие математический аппарат квантовой механики с физическими объектами. Обсудите физический смысл ситуации, при которой величина не имеет определенного значения. Дайте математическое описание этой ситуации.

Объясните, что происходит при реальном измерении в таком случае.

— Запишите операторы производных по времени для координаты, импульса при заданном $\widehat{H}$ и дайте трактовку соответствующих уравнений. Выведите теоремы Эренфеста и дайте качественный анализ их содержания. Назовите законы сохраиения в квантовой механике и условия, в которых они выполняются. Проанализируйте связь между законами сохранения и уравнением Шредингера, с одной стороны, симметриями пространства-времени — с другой. Найдите непосредственно по функциям состояния четность состояний частицы в потенциальной яме и гармонического осциллятора. Рассчитайте четность кванта, испускаемого при переходе между соседними уровнями для ямы, для осциллятора.

**Упражнение III**

**1.** Покажите, что оператор интегрирования является линейным.

**2.** Покажите, что сумма и произведение линейных операторов являются линейными операторами.

**3.** Покажите, что $[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y]=i\hbar L_z$, где

$$\widehat{L}_x=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$

$$\widehat{L}_y=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad \widehat{L}_z=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

**4.** Найдите квадрат оператора:

$$\widehat{A}=x+\frac{d}{dx}.$$

Ответ: $\widehat{A}^2=x^2+x\frac{d}{dx}+\frac{d^2}{dx^2}+1$.

**5.** Найдите собственные значения и собственные функции оператора: $\widehat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$, где $\varphi$ — угол вращения вокруг оси $Oz$.

Указание. Однозначность собственных функций требует выполнения равенства $f(\varphi+2\pi)=f(\varphi)$.

Ответ. $L_z=m\hbar$, $m=0, \pm1, \pm2, \ldots$, $f_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$.

**6.** Покажите для случая невырожденных собственных значений, что коммутирующие операторы имеют общие собственные функции.

Решение. Дано $\widehat{A}\widehat{B}=\widehat{B}\widehat{A}$. Пусть $\widehat{A}\varphi=a\varphi$. (1)

Требуется доказать, что $\widehat{B}\varphi=b\varphi$.

Для доказательства умножим на оператор $\widehat{B}$ обе стороны равенства (1):

$$\widehat{B}(\widehat{A}\varphi)=\widehat{B}(a\varphi).$$

Используя коммутативность операторов и линейность оператора $\widehat{B}$, получаем

$$\widehat{A}(\widehat{B}\varphi)=a(\widehat{B}\varphi).$$

Сравнивая с (1), видим, что функции $\varphi$ и $\widehat{B}\varphi$ должны совпа-

дать с точностью до постоянного множителя. Отсюда $\widehat{B}\varphi = b\varphi$, что и требовалось доказать.

**7.** Покажите, что сумма самосопряженных операторов есть самосопряженный оператор.

**8.** Покажите, что произведение самосопряженных операторов есть самосопряженный оператор, если операторы коммутируют.

**9.** Покажите, что система функций

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

является ортонормированной на интервале $[-\pi, \pi]$.

**10.** Покажите, что разложение в ряд по системе функций $\varphi_n$ предыдущей задачи эквивалентно разложению в тригонометрический ряд Фурье.

**11.** Разложите в ряд Фурье функцию

$$f(x) = \begin{cases} A, & 0 \leqslant x \leqslant \pi, \\ 0, & -\pi \leqslant x < 0 \end{cases}$$

по системе собственных функций задачи 9. Вычислите сумму ряда в точках $0, \pm\frac{\pi}{2}, \pm\pi$.

Указание. Для вычисления суммы используйте разложение

$$\operatorname{arctg} y = 1 - \frac{1}{3} y^3 + \frac{1}{5} y^5 - \ldots$$

Ответ. $f(x) = \frac{A}{2} + \frac{2A}{\pi} \sum\limits_{s=0}^{\infty} \frac{\sin(2s+1)x}{2s+1}$.

**12.** Покажите, что

$$\int \left| f(x) - \sum_n C_n \varphi_n(x) \right|^2 dx = \int |f|^2 dx - \sum_n |C_n|^2,$$

где $\varphi_n$ — ортонормированная система функций; сумма $\sum\limits_n C_n \varphi_n(x)$ — разложение в ряд функции $f(x)$.

Замечание. Если $\int \left| f(x) - \sum\limits_n C_n \varphi_n(x) \right|^2 dx = 0$, то говорят, что ряд $\sum\limits_n C_n \varphi_n(x)$ сходится в *среднем* к функции $f(x)$. Соотношение

$$\int |f|^2 dx = \sum_n |C_n|^2$$

называется условием замкнутости системы функций $\varphi_n$. Оно в рассматриваемых нами случаях эквивалентно условию полноты.

**13.** Нормируйте на $\delta$-функцию собственные функции оператора проекции импульса $\hat{p}_x$ (см. выражение (8.2)).

Указание. Используйте формулу $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} dx$.

**14.** Покажите, что система собственных функций оператора $\widehat{L}_z$ является ортонормированной, а сам оператор — самосопряженным (см. задачи 5 и 9).

**15.** Система находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\varphi$, где $\varphi$ — угол вращения вокруг оси $Oz$. Определите, с какой вероятностью измерение даст различные значения проекции момента импульса $L_z$ (см. задачу 5).

Ответ. $L_z=m\hbar$, $W_m=0$ при $m\neq\pm1$, а $W_{\pm1}=\frac{1}{2}$.

**16.** Пользуясь операторами координаты и импульса, определите среднее значение этих величин для осциллятора с функцией состояния (6.19).

**17.** Повторите вывод формулы (8.7), предполагая спектр оператора $\hat{A}$ непрерывным.

**18.** Объясните, почему невозможны состояния с определенным вектором момента импульса (см. задачу 3).

**19.** Возможны ли состояния с определенным модулем момента импульса и его проекции на ось $Oz$?

Указание. Используйте данные задачи 3 к главе III и задачи 11 к главе IV.

**20.** Запишите квантовое уравнение движения для гармонического осциллятора.

Ответ. $m\hat{\ddot{x}}=-\omega^2\hat{x}$.

**21.** Запишите преобразование инверсии в сферических координатах.

Ответ. $r\to r'=r$, $\theta\to\theta'=\pi-\theta$, $\varphi\to\varphi'=\varphi+2\pi$.

**22.** Выведите соотношения неопределенностей (4.8), используя основные положения квантовой механики.

Решение.

Будем характеризовать неопределенность в значении какой-либо величины $a$ средним квадратичным отклонением:

$$\delta a=\sqrt{\overline{(a-\bar{a})^2}}=\sqrt{\overline{a^2}-(\bar{a})^2}.$$

Найдем $\delta x$ и $\delta p_x$. Без ограничения общности можно положить $\bar{x}=0$ и $\bar{p}=0$. (Это достигается подходящим выбором системы отсчета.) Согласно формуле (8.7)

$$\overline{x^2}=\int\psi^*x^2\psi dx,\quad \overline{p^2}=\int\psi^*(\hat{p}_x^2)\psi dx=-\hbar^2\int\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}dx.$$

Возьмем теперь очевидное неравенство

$$\int\left|\alpha x\psi+\beta\frac{d\psi}{dx}\right|^2dx\geqslant0, \tag{1}$$

где $\alpha$ и $\beta$ — любые действительные числа.

Преобразуем подынтегральное выражение:

$$\left|\alpha x\psi+\beta\frac{d\psi}{dx}\right|^2=\alpha^2x^2\psi^*\psi+\alpha\beta x\frac{d}{dx}(\psi^*\psi)+\beta^2\frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx}. \tag{2}$$

Используя соотношение (2), представим неравенство (1) в виде

$$A\alpha^2 - B\alpha\beta + C\beta^2 \geqslant 0, \qquad (3)$$

где

$$A = \int x^2 |\psi|^2 \, dx = \overline{x^2},$$

$$B = -\int x \frac{d}{dx}(\psi\psi^*) \, dx,$$

$$C = \int \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} \, dx$$

Интегрируя по частям, получим

$$B = -x\psi^*\psi \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int \psi^*\psi dx = 1,$$

$$C = \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx - \int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \frac{1}{\hbar^2} \overline{p_x^2}.$$

Для выполнения неравенства (3) при любых $\alpha$ и $\beta$ необходимо и достаточно, чтобы

$$4AC \geqslant B^2.$$

Отсюда

$$\delta x \delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}.$$

# ГЛАВА IV. АТОМ ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ СИСТЕМЫ

Основная область применений квантовой механики — строение и свойства вещества на атомно-молекулярном уровне, происходящие там процессы, излучение и поглощение света. Поэтому центральная задача теории — задача об атоме вещества. Для простейшего атома — атома водорода — получается исчерпывающее решение. Изучение его не только даст нам конкретную информацию о данном атоме, но и вооружит сведениями, нужными для изучения других, более сложных атомов. Но начать придется с дополнения сведений о математическом аппарате, нужном для исследования свойств атомов.

## § 10. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

**10.1. Свойства оператора момента импульса и его проекций.** Одной из важнейших величин, характеризующих вращательное движение макроскопических тел, является момент импульса. Еще большее значение он приобретает в квантовой механике, особенно в физике атомов и молекул, где часто момент импульса отдельных частиц или систем имеет определенные значения наряду с энергией.

Чтобы детально исследовать строение атомов, необходимо прежде познакомиться с квантовыми особенностями момента импульса. Напомним вид оператора этой физической величины:

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar[\vec{r}\nabla]. \tag{10.1}$$

Запишем операторы проекций момента импульса на оси декартовых координат:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Можно показать, что операторы $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$ удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_y \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \tag{10.2}$$

Так как они не коммутируют друг с другом, то не существует состояний с тремя определенными проекциями момента импульса (за исключением случая $L_x = L_y = L_z = 0$).

Оператор квадрата момента импульса:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

коммутирует с операторами проекций $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$. Это означает, что возможны состояния с определенным модулем момента импульса (с определенным значением величины $L^2$) и какой-нибудь из его проекций.

При изучении движения частицы в центральном поле целесообразно использовать сферические координаты $r$, $\theta$ и $\varphi$. Перейдем в формулах для проекций момента к переменным $r$, $\theta$ и $\varphi$. Известно, что

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta$$

В сферических координатах получаем (см. задачи 1, 2, 11 к главе IV)

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{10.3}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Поскольку ось $Oz$ выбрана в качестве полярной оси, равноправие трех декартовых осей координат $Ox$, $Oy$ и $Oz$ при переходе к сферическим координатам теряется: теперь некоторое направление в пространстве выделено, и удобно рассматривать состояния с определенными значениями $L^2$ и $L_z$.

**10.2. Собственные значения и собственные функции операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$.** Коммутирующие операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ имеют общую систему

собственных функций. Для того чтобы найти эти функции, нужно решить уравнение

$$\hat{L}^2\psi(\vec{r})=L^2\psi(\vec{r}). \tag{10.4}$$

В сферических координатах

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\Delta_{\theta\varphi}, \tag{10.5}$$

где

$$\Delta_{\theta,\varphi}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Поэтому уравнение (10.4) сводится к дифференциальному уравнению в частных производных:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=-\frac{L^2}{\hbar^2}\psi, \tag{10.6}$$

хорошо известному в математике (см. любой курс методов математической физики, раздел «Уравнение Лапласа в сферических координатах»). Оно имеет однозначные, непрерывные и всюду ограниченные решения при условии

$$L^2=\hbar^2 l(l+1),\ l=0,\ 1,\ 2,\ ..., \tag{10.7}$$

которым определяются собственные значения оператора квадрата момента импульса.

Искомые решения уравнения (10.4) называются *сферическими функциями*. Сферическая функция индексов $l$ и $m$ обозначается символом $Y_{lm}$. Она имеет вид

$$Y_{lm}(\theta,\ \varphi)=N_{l|m|}P_l^{|m|}(\cos\theta)\,e^{im\varphi}, \tag{10.8}$$

где $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ — присоединенный полином Лежандра от аргумента $\cos\theta$.

Приведем выражение для полиномов Лежандра $x=\cos\theta$:

$$P_l^{|m|}(\cos\theta)=\frac{1}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}(x^2-1)^l. \tag{10.9}$$

Если сферические функции нормированы условием

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}|Y_{lm}|^2\sin\theta\,d\theta\,d\varphi=1, \tag{10.10}$$

то нормировочный множитель в формуле (10.8) таков:

$$N_{l|m|}=\sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\frac{2l+1}{4\pi}}.$$

(Произведение $\sin\theta d\theta d\varphi$ есть элементарный телесный угол $d\Omega$. Следовательно, в интеграле (10.10) производится интегрирование по всем возможным направлениям в пределах полного телесного угла, равного $4\pi$.)

Функции с неодинаковыми индексами $l$ или $m$ ортогональны друг другу:

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{l_1 l_2}\,\delta_{m_1 m_2}.$$

Выпишем несколько сферических функций:

$$\left.\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}};\quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(1-3\cos^2\theta),\\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_{2,\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi},\\ Y_{1,\pm 1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi},\quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}\right\} \quad (10.11)$$

Квантовое число $l$ определяет модуль момента импульса. Состояния с небольшими значениями $l$ часто обозначаются буквами латинского алфавита.

| $l$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Буквенное обозначение | $s$ | $p$ | $d$ | $f$ | $g$ | $h$ | $i$ |

Говорят, например, что частица находится в $p$-состоянии, или, другими словами, что ее момент импульса равен 1. Это означает, что $l=1$ и $L=\hbar\sqrt{2}$.

Состояния с заданным моментом импульса вырождены по квантовому числу $m$. Физический смысл второго квантового числа раскрывается при решении задачи о собственных функциях и собственных значениях оператора проекции момента импульса $L_z$.

Уравнение

$$\hat{L}_z\psi = L_z\psi,$$

или

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = L_z\psi,$$

имеет частные решения вида

$$\psi = Ce^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi}.$$

Поскольку полный обход вокруг оси $Oz$ при изменении угла $\varphi$ на $2\pi$ приводит нас в исходную точку пространства ($r$ и $\theta$ постоянны), то из условия однозначности решения следует равенство

$$\psi(\varphi+2\pi) = \psi(\varphi).$$

Оно удовлетворяется, если положить

$$L_z = m\hbar,\quad m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots \quad (10.12)$$

После нормировки и подстановки $L_z$ собственные функции опе-

ратора $\widehat{L}_z$ принимают вид

$$\psi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}. \qquad (10.13)$$

Часто используются названия: для $l$ — *азимутальное*, или *орбитальное*, квантовое число; для $m$ — *магнитное* квантовое число.

Из формул (10.8) и (10.13) видно, что сферические функции являются общими собственными функциями как оператора $\widehat{L}^2$, так и оператора $\widehat{L}_z$. Кроме того, из выражения (10.9) следует, что состояния с заданными моментом и его проекцией $L_z$ возможны, если $l \geqslant |m|$. Физически это условие вполне очевидно, так как проекция по модулю не может быть больше модуля вектора. Итак, $m$ принимает $2l+1$ значение:

$$m=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ ..,\ \pm l.$$

В целях наглядности результаты квантования момента импульса и его проекции отображают в чертежах, подобных рисунку 10.1. Данные рисунка соответствуют значению $l=2$. Радиус полуокружности равен (в принятом масштабе) $L$, т. е. $\hbar\sqrt{6}$. Следует помнить об условном характере таких рисунков: по аналогии с классикой принято сопоставлять состояниям с одним $l$ и разными $m$ различные определенные ориентации вектора момента импульса, хотя две другие проекции и не имеют определенного значения.

В приложениях часто применяется полуклассическая векторная модель момента импульса (рис. 10.2). Считается, что вектор момента импульса быстро вращается (прецессирует) вокруг оси $Oz$, сохраняя свой угол наклона к оси (см. ч. I, пример 17.3). Для подобной классической системы величина момента и проекция $L_z$ являются интегралами движения. Значения $L_x$ и $L_y$ непостоянны, а средние значения этих величин равны нулю. Сходство с квантовыми системами

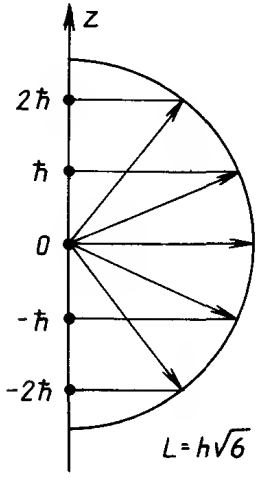



Рис. 10 1.

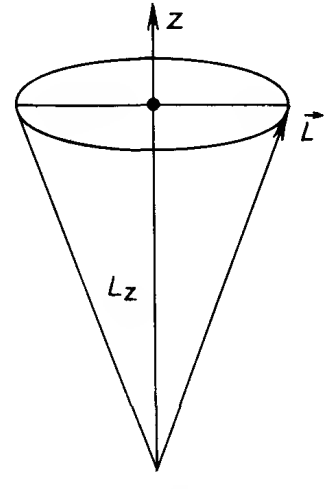



Рис. 10 2.

здесь в том, что имеется определенное значение момента и его проекции $L_z$ и равны нулю средние значения $\overline{L}_x$ и $\overline{L}_y$.

Очень важное различие квантового и классического моментов импульса заключается в том, что отношение $L_z/L$ (косинус угла наклона) в квантовом случае принимает дискретный ряд значений. Этот факт получил название *пространственного квантования*. Он может быть учтен в рамках векторной модели с помощью дополнительного положения о дискретном наборе ориентаций вектора $\vec{L}$ по отношению к оси $Oz$. (Заметим, что момент импульса не может быть направлен точно по оси.) Выбор оси $Oz$ в свободном пространстве, разумеется, совершенно произволен. Однако если некоторое направление в пространстве физически выделено, то направление оси $Oz$ совпадает с ним.

**10.3. Движение частицы в центрально-симметричном поле.** Центрально-симметричным называется силовое поле с потенциальной энергией, зависящей только от расстояния до некоторого центра Центр удобно взять в качестве начала координат: $U = U(r)$

Сила, действующая на частицу в таком поле, направлена по радиусу. Поэтому при движении классической частицы сохраняется не только полная механическая энергия, но и момент импульса. В силу принципа соответствия следует ожидать появления тех же интегралов движения и в квантовой механике.

Для изучения стационарных состояний нужно решить уравнение Шредингера (8.4) для движения в центральном силовом поле. Симметрия поля подсказывает, что следует воспользоваться сферическими координатами:

$$\widehat{H}\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = E\psi(r,\ \theta,\ \varphi),$$

где гамильтониан имеет вид

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \frac{1}{2mr^2}\widehat{L}^2 + U(r). \qquad (10.14)$$

Через $\Delta_r$ обозначен оператор:

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right).$$

Если внимательно рассмотреть формулы (10.3), (10.5) и (10.14), то нетрудно установить, что операторы $\widehat{H}$, $\widehat{L}^2$ и $\widehat{L}_z$ коммутируют друг с другом. Отсюда следует, что существуют стационарные состояния, в которых одновременно заданы энергия, момент импульса и его проекция на некоторую ось, принятую за ось $Oz$.

Уравнение (10.14) допускает разделение переменных. Ищем волновую функцию в виде произведения радиального и углового множителей:

$$\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = R(r)\,Y(\theta,\ \varphi) \qquad (10.15)$$

После подстановки получаем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Y\Delta_r R+\frac{R}{2mr^2}\widehat{L}^2 Y+URY=ERY.$$

Умножим его на $-2mr^2$ и разделим на $RY$. Уравнение примет вид

$$\hbar^2\frac{r^2}{R}\Delta_r R-2mU(r)\,r^2+2mEr^2=\frac{1}{Y}\widehat{L}^2 Y.$$

Правая и левая части этого равенства есть функции разных независимых переменных, поэтому они должны быть равны одной и той же постоянной величине. Обозначим ее через $\lambda$. Теперь исходное уравнение Шредингера распадется на два уравнения

$$\frac{1}{Y}\widehat{L}^2 Y=\lambda,$$

и

$$\hbar^2\frac{r^2}{R}\Delta_r R-2mr^2U(r)+2mEr^2=\lambda.$$

Первое из них есть уравнение для собственных функций и собственных значений оператора квадрата момента импульса. Его решение нам известно. Используя данные предыдущего пункта, заключаем, что угловая часть волновой функции $\psi(r, \theta, \varphi)$ выражается одной из сферических функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, а $\lambda=\hbar^2 l(l+1)$.

Учитывая значения $\lambda$, запишем второе уравнение в виде

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R=0. \qquad (10.16)$$

Это уравнение называется радиальным. Для его предварительного анализа сделаем подстановку:

$$R=\frac{g(r)}{r}. \qquad (10.17)$$

Новая искомая радиальная функция $g(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2g}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]g=0. \qquad (10.18)$$

Оно по форме совпадает с одномерным уравнением Шредингера для движения частицы в поле с эффективным потенциалом:

$$U_{\text{эф}}=U(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \qquad (10.19)$$

Дальнейшее решение задачи о движении частицы в центрально-симметричном поле требует знания вида потенциала $U(r)$.

Соберем воедино все найденные сведения по вопросу о движении частицы в центральном поле:

1) Возможны стационарные состояния с определенными значениями энергии, момента импульса и его проекции на ось $Oz$.

2) Указанные состояния различаются квантовыми числами $l$ и $m$, определяющими момент импульса частицы и его проекцию.

3) Энергия стационарного состояния зависит от конкретного вида центрального поля и должна быть определена вместе с радиальным множителем в формуле (10.15) в процессе решения уравнения (10.16) или (10.18).

Полезно заметить, что эти выводы справедливы для любого постоянного силового поля с центральной симметрией. Далее их используем для решения конкретной задачи об атоме водорода, задаваясь для радиального уравнения кулоновским потенциалом: $U = -\frac{\varkappa e^2}{r}$.

## § 11. ЗАДАЧА ОБ АТОМЕ ВОДОРОДА

**11. 1. Постановка задачи об атоме водорода.** Энергия ионизации атома водорода примерно 13,6 эВ, что намного меньше энергии покоя электрона (0,51 МэВ). Следовательно, задача об атоме водорода может решиться в рамках нерелятивистской квантовой механики — выполняется закон сохранения числа частиц, а также можно применять нерелятивистское уравнение Шредингера. Если пренебречь весьма малыми магнитными взаимодействиями, о которых речь пойдет дальше, то можно считать, что электрон находится в поле кулоновской силы электростатического притяжения к ядру. Потенциальная энергия электрона выражается классической формулой

$$U(r) = -\frac{\varkappa e^2}{r}, \qquad (11.1)$$

где $r$ — расстояние электрона до ядра, а $\varkappa = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$ — постоянная величина. Поле является центрально-симметричным, и мы можем воспользоваться всеми результатами предыдущего параграфа.

При решении задачи об атоме водорода интерес представляет движение электрона по отношению к ядру; ядро считается неподвижным. Это оправдано, так как масса ядра почти в 2000 раз больше массы электрона. Однако для сопоставления теоретически найденных уровней энергии с экспериментальными, измеряемыми с точностью до 8 и более значащих цифр, необходимо учесть, что ядро тоже движется вокруг центра масс атома. Как в классической механике, так и в квантовой учет движения ядра в формулах для динамических параметров системы прост; нужно лишь заменить в уравнениях движения массу электрона на приведенную массу:

$$\mu = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p}$$

(о классической задаче двух тел см. ч. I, § 15). Поэтому уравнение Шредингера приведет к формуле энергии электрона, где вместо $m$ стоит $\mu$. Что касается функции состояния, то можно считать, что она характеризует движение электрона относительно ядра в систе-

ме, связанной с движущимся в пространстве ядром (подробнее о квантовой задаче двух частиц см. § 14).

Ниже полагаем, что ядро находится в начале координат. Массу электрона — приведенную или обыкновенную — обозначаем через $\mu$.

Угловая часть волновой функции электрона уже известна: это сферическая функция $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Для нахождения радиальной части нужно решить радиальное уравнение (10.16) или (10.18) с кулоновским потенциалом. В данном случае эффективный потенциал имеет вид

$$U_{эф} = -\frac{\varkappa e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

Общий ход кривой $U_{эф}$ дан на рисунке 5.1. При $r \to 0$ $U_{эф}$ ведет себя как $\frac{1}{r^2}$, на больших расстояниях функция $U_{эф}(r)$ приближается к нулю как $\frac{1}{r}$ со стороны отрицательных значений. Для нас наиболее важна область потенциальной ямы. Здесь при отрицательных энергиях движение частицы происходит в ограниченной области пространства и *возможны связанные состояния с дискретными значениями энергии.*

**11.2. Решение радиального уравнения.** Запишем радиальное уравнение (10.16) с кулоновским потенциалом (11.1):

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{\varkappa e^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R = 0 \qquad (11.2)$$

Для упрощения уравнения перейдем к безразмерной переменной $\rho = \frac{r}{a}$, где $a = \frac{\hbar^2}{\varkappa \mu e^2}$ — постоянная, называемая боровским радиусом. Расчет дает на основании известных констант $\hbar$, $\mu$, $\varkappa$, $e$ следующее ее значение: $a = 0{,}52 \cdot 10^{-8}$ см $\simeq 0{,}5$ Å. Эта величина определяет порядок расстояний в атоме.

Введем также обозначения:

$$\beta^2 = -\frac{E}{Ry}, \quad Ry = \frac{\mu \varkappa^2 e^4}{2\hbar^2}. \qquad (11.3)$$

Постоянная $Ry$ имеет размерность энергии: ее значение $Ry \simeq 13{,}6$ эВ дает порядок энергии электрона в атоме.

Нашей целью является изучение связанных состояний электрона, для которых $E < 0$, а $\beta^2 > 0$, причем $\beta$ — величина безразмерная и действительная. После подстановки $\rho$ и $\beta$ в уравнение (11.2) получаем новое уравнение

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(-\beta^2 + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R = 0. \qquad (11.4)$$

Это уравнение и необходимо решить для нахождения искомой радиальной функции в поставленной выше задаче об атоме водорода.

Уравнение является дифференциальным уравнением второго по-

рядка, причем коэффициенты при $\frac{dR}{d\rho}$ и $R$ в нем — функции $\rho$. Решение таких уравнений с переменными коэффициентами — довольно сложная математическая задача, разрешаемая с помощью метода степенных рядов. Приведем сначала результаты решения (ниже оно прослежено в основных чертах).

Уравнение (11.4) имеет удовлетворяющие необходимому условию квадратичной интегрируемой функции состояния решения, если выполняется равенство

$$n_r + l + 1 = \frac{1}{\beta}, \tag{11.5}$$

где $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ носит название *радиального* квантового числа. Обычно вводится *главное* квантовое число $n$ соотношением

$$n = n_r + l + 1, \tag{11.6}$$

откуда с учетом значений $l$ видно, что

$$n = 1, 2, 3,$$

Из формулы (11.5) с учетом (11.6) и обозначения $\beta$ в формуле (11.3) следует формула энергии:

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2}. \tag{11.7}$$

Энергия стационарных состояний квантуется главным квантовым числом $n$. Оно же входит и в функции стационарных состояний через радиальный множитель — решение уравнения (11.4). Мы записываем его, возвращаясь к исходной переменной $r$:

$$R_{nl}(r) = \frac{2^{l+1}}{n^{l+2}a^{3/2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\left(\frac{r}{a}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right). \tag{11.8}$$

Здесь $L$ — полиномы переменной величины $\frac{2r}{na}$, вычисляющиеся по полиномообразующей формуле: если $\frac{2r}{na} = x$, то

$$L_{n+l}^{2l+1}(x) = \frac{d^{2l+1}}{dx^{2l+1}}\left[e^x \frac{d^{n+l}}{dx^{n+l}}(e^{-x}x^{n+l})\right] \tag{11.9}$$

(они называются полиномами Лагерра).

Функции $R_{nl}$ нормированы на единицу условием

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1. \tag{11.10}$$

Приведем в качестве примеров радиальные волновые функции для основного и ближайших к нему возбужденных состояний:

$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad R_{20} = \frac{1}{a^{3/2}\sqrt{2}} e^{-\frac{r}{2a}}\left(1 - \frac{r}{2a}\right),$$
$$R_{21} = \frac{r}{2a^{5/2}\sqrt{6}} e^{-\frac{r}{2a}}, \tag{11.11}$$

Можно показать, что радиальные функции имеют $n-l-1$ узлов — пересечений с осью $r$ в интервале $(0, \infty)$.

Проследим за принципиальными этапами решения радиального уравнения. Прежде чем искать функцию $R(\rho)$ в виде степенного ряда, обеспечим достаточно «хорошее» поведение решения при $\rho\to\infty$: нужно, чтобы $R(\rho)$ стремилось к нулю.

Если $\rho\to\infty$, то уравнение (11.4) асимптотически стремится к виду

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\beta^2\rho=0.$$

Это асимптотическое уравнение имеет решение, обращающееся в нуль на бесконечности:

$$R=e^{-\beta\rho}.$$

Далее оно будет принято во внимание при поисках вида решения уравнения (11.4).

Надо также исключить возможную сингулярность — бесконечно большое значение $R(\rho)$ при $\rho\to 0$. Если $\rho\to 0$, то уравнение (11.4) может быть записано приближенно:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R=0.$$

Это асимптотическое уравнение имеет два решения:

$$R_1=\rho^{-(l+1)},\quad R_2=\rho^l, \tag{11.12}$$

причем первое следует отбросить, так как при $\rho\to 0$ $R_1\to\infty$.

Итак, асимптотика решения уравнения (11.4) определяется найденными функциями. Основываясь на этом, ищем функцию $R(\rho)$ в виде

$$R(\rho)=e^{-\beta\rho}\rho^l f(\rho), \tag{11.13}$$

где $f(\rho)$ — новая неизвестная функция. Подстановка предполагаемого решения (11.13) в уравнение (11.4) приводит к следующему в нашей цепи уравнению для неизвестной функции $f(\rho)$:

$$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2}+2(l+1-\beta\rho)\frac{df}{d\rho}+2(1-\beta-\beta l)f=0. \tag{11.14}$$

Сделаем замену переменных в уравнении (11.14), упрощающую его:

$$x=2\beta\rho.$$

Получается

$$x\frac{d^2f}{dx^2}+(2l+2-x)\frac{df}{dx}+\left(\frac{1}{\beta}-l-1\right)f=0. \tag{11.15}$$

Это уравнение и решаем по методу степенного ряда, т. е. ищем решение в виде

$$f(x)=\sum_{j=0}^{\infty}b_jx^j. \tag{11.16}$$

Подставляя ряд (11.16) в уравнение (11.15), имеем

$$\sum_j j(j-1)b_jx^{j-1}+\sum_j jb_jx^{j-1}(2l+2-x)+\sum_j b_jx^j\left(\frac{1}{\beta}-l-1\right)=0. \tag{11.17}$$

Чтобы ряд (11.16) был решением уравнения (11.15), необходимо выполнение равенства (11.17) при всех значениях $x$, т. е. обращение его в тождество. А последнее возможно, если сумма коэффициентов при любой степени переменной будет равна нулю.

Выпишем все слагаемые в левой части равенства (11.17), содержащие $x^k$

($k=0, 1, 2, \ldots$). В первой сумме это слагаемые с $j=k+1$, во второй — с сомножителем $(2l+2)$ — также с $j=k+1$, все остальные члены берем с $j=k$:

$$x^k\left[(k+1)\,kb_{k+1}+2(l+1)(k+1)\,b_{k+1}-kb_k+\left(\frac{1}{\beta}-l-1\right)b_k\right]=0.$$

Отсюда вытекает условие, которому должны удовлетворять коэффициенты ряда (11.16):

$$b_{k+1}=\frac{k+l+1-\frac{1}{\beta}}{(k+1)(k+2l+2)}\,b_k. \tag{11.18}$$

Итак, решение уравнения (11.5) найдено: это бесконечный степенной ряд, коэффициенты которого вычисляются по рекуррентной формуле (11.18), а $b_0$ берется произвольно и играет роль постоянной интегрирования. Но анализ показывает, что ряд (11.16) с коэффициентами (11.18) при $x\to\infty$ расходится, и притом настолько быстро, что функция $R(r)$, задаваемая соотношением (11.13), тоже обращается в бесконечность. Поэтому решение в виде бесконечного степенного ряда не удовлетворяет физическим условиям — функция состояния электрона должна быть всюду ограниченной и затухающей на бесконечности.

Решения, удовлетворяющие требованиям ограниченности, можно получить из бесконечного ряда: часть его (полином некоторой степени $n_r$) также является решением уравнения (11.4), так как его коэффициенты удовлетворяют рекуррентной формуле. Поэтому обрываем ряд на члене $b_{n_r}x^{n_r}$, т. е. $b_{n_r}\neq 0$, а все последующие коэффициенты: $b_k=0$. С помощью формулы (11.18) имеем условие обрыва ряда:

$$n_r+l+1=\frac{1}{\beta}, \tag{11.19}$$

где $n_r=0, 1, 2, \ldots$ носит название радиального квантового числа.

Далее, как об этом уже говорилось, формула (11.19) приводит к квантованию энергии. Здесь же покажем, как вычисляются искомые полиномы. Рекуррентная формула с учетом условия (11.19) приобретает вид

$$b_{k+1}=\frac{k-n_r}{(k+1)(k+2l+2)}\,b_k. \tag{11.20}$$

Здесь $k$ — текущий индекс рассчитываемого коэффициента, а $n_r$ — индекс (и степень) старшего члена. Задаваясь произвольным значением коэффициента $b_0$, для каждого $n_r$ находим все коэффициенты $b_k$. Записываем полином:

$$b_0+b_1x+b_2x^2+\ldots+b_{n_r}x^{n_r}=L^l_{n_r}(x).$$

Он определяется двумя параметрами: $n_r$ и $l$.

Но есть и другой путь. Если подставить значение $\beta$, найденное из условия обрыва ряда (11.19), выраженное через главное квантовое число

$$\frac{1}{\beta}=n$$

в уравнение (11.15), то получим уравнение

$$x\frac{d^2f}{dx^2}+(2l+2-x)\frac{df}{dx}+(n-l-1)f=0.$$

Оно может быть сведено к известному в математике уравнению Лагерра, а решение его — полиномы Лагерра $L^{2l+1}_{n+l}(x)$ — определяется сравнительно простой в использовании для вычислений полиномообразующей формулой (11.9), приведенной выше. Понятно, что они с точностью до постоянного множителя совпадают с ранее рассмотренным $L^l_{n_r}$. (Множитель значения для нас не имеет, так как функции будут нормироваться.)

Для получения окончательного результата — решения радиального уравнения —

надо перейти к первоначальной переменной $r$ с помощью использованных подстановок: $x=2\beta\rho$ и $\rho=\frac{r}{a}$. Отсюда с учетом формул (11.19) и (11.6)

$$x=\frac{2r}{na}.$$

Теперь, предусматривая в решении (11.13) исходного радиального уравнения (11.4) нормировочный множитель $N_{nl}$, имеем окончательно

$$R_{nl}(r)=N_{nl}\left(\frac{r}{a}\right)^{l}e^{-\frac{r}{na}}L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right).$$

Эта формула и приведена ранее — (11.8) — с вычисленным нормировочным множителем. Радиальное уравнение решено.

**11.3. Итоги решения задачи об атоме водорода.** Задача об атоме водорода выше решена в общем виде. На основе полученных результатов можно детально описать стационарные состояния электрона. Они определяются тройкой квантовых чисел $n$, $l$ и $m$. Квантовые числа позволяют рассчитать для каждого состояния значения трех физических величин, имеющих одновременно определенные значения. Это энергия, момент импульса и его проекция:

$$E_n=-Ry\frac{1}{n^2},\quad L=\hbar\sqrt{l(l+1)},\quad L_z=m\hbar.$$

Согласно формуле (11.6) $n=n_r+l+1$, т. е. $n\geqslant l+1$. Поэтому при заданном главном квантовом числе орбитальное квантовое число пробегает $n$ разных значений от 0 до $n-1$. При фиксированных $n$ и $l$ может быть $2l+1$ состояний, отличающихся значениями магнитного квантового числа. Нам потребуется в дальнейшем знать количество состояний с одним и тем же $n$, но различными $l$ и $m$. Оно определяется суммированием состояний с различными $m$ по всем значениям $l$:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=1+3+\ldots+[2(n-1)+1].$$

Используя формулу суммы арифметической прогрессии, имеем

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=\frac{2(n-1)+1+1}{2}n=n^2.$$

Такова кратность вырождения уровней энергии электрона в атоме водорода, так как все эти состояния имеют одну и ту же энергию.

Имеется и все необходимое, чтобы записать полную функцию состояния атома водорода — радиальный и угловой ее сомножители известны и определяются формулами (11.8) и (10.8). Итак,

$$\psi_{nlm}(r,\ \theta,\ \varphi)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\ \varphi). \qquad (11.21)$$

Согласно выражениям (10.10) и (11.10) функции состояния $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ нормированы условием

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 1.$$

**11.4. Водородоподобные системы.** Водородоподобными называются все системы, состоящие из двух противоположно заряженных частиц, связанных электростатическим взаимодействием. К ним относятся одноэлектронные ионы всех атомов, позитроний (система из электрона и позитрона), антиатомы, состоящие из антипротонов и позитрона, мюоний (протон и мюон) и т. д.

Так же как и для водорода, относительное движение частиц сводится к движению одной частицы с массой, равной приведенной массе системы $\mu$, в центрально-симметричном кулоновском поле неподвижного притягивающего центра. Потенциальная энергия частицы задается выражением

$$U = -\frac{\varkappa Z e^2}{r}$$

Запишем радиальное уравнение (10.16) для водородоподобной системы:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{\varkappa Z e^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right] R = 0. \qquad (11.22)$$

Оно только значениями постоянных отличается от аналогичного уравнения для атома водорода. Если ввести обозначения

$$a' = \frac{\hbar^2}{\mu \varkappa Z e^2}, \quad Ry' = \frac{\mu \varkappa^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2}, \quad \beta^2 = -\frac{E}{Ry'}$$

и сделать замену переменной $r$ на $\rho = \frac{r}{a'}$, то придем к уравнению (11.4) в теории атома водорода.

Поэтому все результаты решения задачи об атоме водорода полностью переносятся на водородоподобные системы. Следует только во всех формулах заменить постоянные $a$ и $Ry$ на $a'$ и $Ry'$. Например, для иона гелия $He^+$ $(Z=2)$,

$$\mu = \frac{m_e m_{He}}{m_e + m_{He}} \approx m_e.$$

Уровни энергии определяются формулой

$$E_n = -\frac{Ry'}{n^2} \approx -\frac{Z^2 Ry}{n^2} = -\frac{4Ry}{n^2}.$$

Стационарные состояния характеризуются теми же квантовыми числами $n$, $l$ и $m$, и они имеют тот же физический смысл. Сохраняются общий вид и структура волновых функций (с учетом замены $a$ на $a'$).

## § 12. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА АТОМА ВОДОРОДА В СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЯХ

**12.1. Угловое и радиальное распределение плотности электронного облака.** В предыдущем параграфе решено уравнение для движения электрона в кулоновском поле. Результаты решения дают возможность сделать заключение о пространственной структуре и других характеристиках атома водорода.

Запишем выражение для вероятности обнаружения электрона в элементе объема ($dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$) вблизи точки с координатами $r$, $\theta$ и $\varphi$.

$$dW = |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 dV = R^2(r)\, Y^*(\theta, \varphi)\, Y(\theta, \varphi)\, r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \tag{12.1}$$

(Квантовые числа для сокращения записи опущены.) Распределению вероятностей (12.1) сопоставляется представление об электроне в виде облака, имеющего плотность, пропорциональную квадрату модуля волновой функции. При этом величина $-e|\psi|^2$ рассматривается как плотность заряда электрона, непрерывно распределенного в пространстве. (Иногда используется следующая корпускулярная интерпретация строения атома: считается, что электрон быстро обегает пространство, занятое атомом, причем время его пребывания в объеме $dV$ пропорционально $|\psi|^2$.)

Конфигурация электронного облака задает пространственную структуру атома Ввиду сложности волновой функции целесообразно рассмотреть сначала радиальное распределение плотности облака, а затем — угловое.

Рассчитаем с помощью выражения (11 21) вероятность обнаружения электрона в шаровом слое между сферами радиусом $r$ и $r+dr$. Для этого проинтегрируем распределение (12.1) по углам $\theta$ и $\varphi$ в полном интервале изменения этих переменных. Получим

$$dW = R^2(r)\, r^2 dr$$

Плотность вероятности для значений координаты $r$ описывается функцией

$$w_{nl}(r) = R_{nl}^2(r)\, r^2. \tag{12.2}$$

Далее можно воспользоваться найденными ранее выражениями (11.11) для $R_{nl}$ и найти зависимость плотности электронного облака от расстояния до центра атома для различных состояний.

Диаграммы для $w_{1,0}$, $w_{2\,0}$, $w_{2,1}$ представлены на рисунке 12 1. Очевидно, что вблизи ядра и на больших расстояниях от него вероятность обнаружить частицу весьма мала. Плотность облака значительна на конечных расстояниях от начала координат. Здесь функция $w_{nl}(r)$ обращается в нуль $n-l-1$ раз, и облако разбивается на слои

Вычисление средних расстояний приводит к формуле

$$\bar{r}_{nl} = \frac{a}{2}[3n^2 - l(l+1)],$$

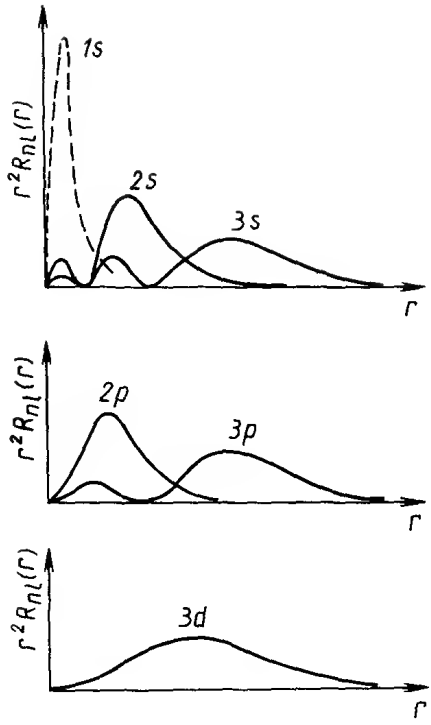



Рис 12 1.

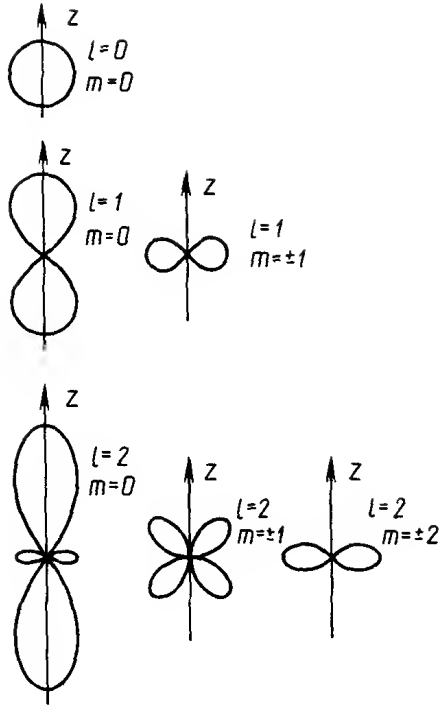



Рис. 12.2

$\bar{r}_{nl}$ быстро растет при увеличении главного квантового числа, а при заданном $n$ убывает с ростом орбитального квантового числа $l$.

Резкой границы у атома нет. Однако плотность электронного облака очень быстро (экспоненциально) спадает при $r > \bar{r}$. При $r \to \infty$ вероятность обнаружить электрон практически равна нулю. В состояниях с $l = n - 1$

$$w(r) \sim r^{2n} e^{-\frac{2r}{na}},$$

и максимум функции $w(r)$ в этом случае достигается в точке $r = an^2$. Эти расстояния совпадают с боровскими радиусами круговых орбит.

Перейдем к угловому распределению электронного облака. Согласно формулам (12 1) и (11.10) вероятность обнаружения частицы в пределах элементарного телесного угла $d\Omega$, равного $\sin\theta d\theta d\varphi$ и взятого в направлении, заданном углами $\theta$ и $\varphi$, определяется формулой

$$dW(\theta, \varphi) = Y^*_{lm}(\theta, \varphi)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

Соответственно плотность вероятности

$$w_{lm} = Y^*_{lm}(\theta, \varphi)\, Y_{lm}(\theta, \varphi). \qquad (12.3)$$

Поскольку зависимость функции $Y_{lm}$ от угла $\varphi$ имеет вид $e^{im\varphi}$, то

плотность вероятности углового распределения не зависит от $\varphi$, что указывает на осевую симметрию электронного облака.

Распределение по полярному углу $\theta$ часто представляют графически в виде полярных диаграмм. Они строятся следующим способом. На координатной прямой $r$ полярной системы координат от точки $O$ откладывается значение $w_{lm}(\theta, \varphi)$. Через полученные точки проводится линия. Чем дальше точки кривой отстоят от начала координат, тем больше вероятность обнаружить частицу в заданном направлении.

Рассмотрим в качестве примера три состояния (см. формулы (10.11)):

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\ Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{1,\pm1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm im\varphi}$$

Соответствующие полярные диаграммы изображены на рисунке 12.2. В $s$-состояниях облако имеет сферическую симметрию. В $p$-состояниях при $m=0$ оно вытянуто вдоль оси $Oz$, а при $m=\pm1$ облако сгущается в экваториальной плоскости. На полярной оси вероятность нахождения частицы равна нулю.

Мы предлагаем читателю в качестве упражнения свести воедино радиальное и угловое распределения для электронного облака в состояниях $1s$, $2s$ и $2p$ ($m=0, \pm1$): изображение атома в разных состояниях показано на переднем форзаце.

Для больших значений $n$ и $l$ строение атома водорода оказывается довольно сложным. Для ознакомления с этим вопросом следует обратиться к более детальным руководствам или справочникам (см. [21]).

**12.2. «Вращение» электронного облака.** Неравный нулю момент импульса указывает на вращение электрона вокруг ядра. Движение частицы легко представить в рамках классического корпускулярного подхода, однако у электрона определенной траектории и скорости нет. При классическом волновом подходе частице сопоставляется облако, которое сложным образом, отнюдь не как единое целое совершает вращательное движение. Величина, которая на квантовом языке характеризует движение микрочастицы, есть вектор плотности потока вероятности.

Для его вычисления используем формулы (2.3), (3.15) и выражение для оператора $\nabla$ в сферических координатах:

$$\nabla=\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Если волновая функция имеет вид

$$\psi_{nlm}=NR_{nl}(r)\,P_l^{|m|}(\theta)e^{im\varphi},$$

то следует принять в формуле (3.15):

$$R=NR_{nl}(r)\,P_l^{|m|}(\theta),\ \alpha=m\varphi.$$

Массу частицы примем равной $\mu$. Тогда получаем

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{\mu}N^2R_{nl}^2[P_l^{|m|}(\theta)]^2\frac{m\vec{e}_\varphi}{r\sin\theta}=\frac{\hbar m\vec{e}_\varphi}{\mu r\sin\theta}|\psi_{nlm}|^2. \qquad (12.4)$$

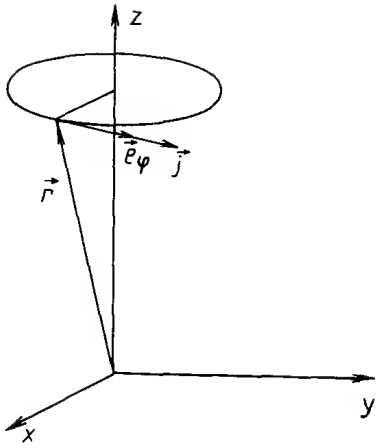



Рис 12 3

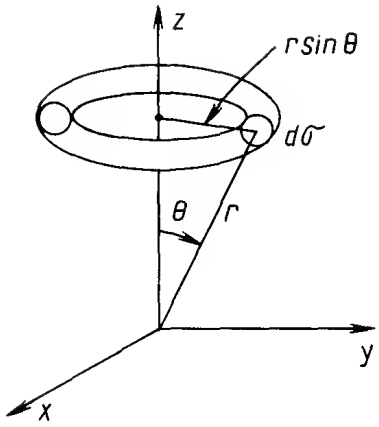



Рис 12 4

Линии вектора $\vec{j}$ есть замкнутые окружности с центрами на оси $Oz$ (рис. 12.3). Они лежат в плоскостях, параллельных плоскости $xOy$. Во всех точках окружности модуль вектора один и тот же. Это следствие осевой симметрии и стационарности плотности облака; при вращении его конфигурация не изменяется.

В соответствии с классическим образом электронного облака плотность потока массы в нем пропорциональна плотности облака, но коэффициент пропорциональности в формуле (12.4) — величина, зависящая от переменных $r$ и $\theta$. Это значит, что облако вращается не как одно целое; скорости зависят и от расстояний до ядра $r$, и от угловой координаты пояса $\theta$.

В заключение вопроса о форме и размерах электронного облака, вращении его следует заметить, что все сказанное выше имеет условный характер и не должно пониматься в буквальном смысле классического объекта с непрерывно распределенными по пространству массой и зарядом. Облако лишь наглядная модель вероятностно-статистической трактовки функции состояния.

Мы рассматривали атом водорода, но в общих чертах полученные результаты относятся не только к водородоподобным системам, но и к многоэлектронным атомам, ибо в них в первом приближении электроны описываются используемыми выше функциями состояния.

Пример 12.1. **Расчет момента импульса электрона в атоме на основе представлений об электронном облаке.**

Если воспользоваться классическим представлением об электронном облаке как области пространства, в которой непрерывно распределена масса электрона $\mu$, то, опираясь на размерность вектора $\vec{j}$, можно заключить, что величина $\mu\vec{j}$ выражает объемную плотность импульса вращающегося облака.

Рассматривая элемент объема $dV$ на линии тока (рис. 12.4), имеем для его импульса выражение

$$d\vec{p} = \mu\vec{j}dV.$$

Ему соответствует момент импульса:

$$d\vec{L} = \mu[\vec{r}\vec{j}]\,dV,$$

направленный по оси симметрии атома, что позволяет далее ограничиваться одной его проекцией на ось $Oz$:

$$dL = \mu j r \sin\theta dV.$$

Осталось подставить сюда значение $j$ из формулы (12.4) и просуммировать по всему объему:

$$dL = \hbar m |\psi_{nlm}|^2 dV,$$

$$L = \int dL = \hbar m.$$

Получено правильное значение проекции момента на ось $Oz$ (см. § 11, п. 3). Однако наше решение не является исчерпывающим. Мы пользовались для вычисления вектора $\vec{L}$ классической формулой $\vec{L} = [\vec{r}\,\vec{p}]$, что привело к утрате важных деталей; вектор $\vec{L}$ в нашем решении направлен по оси $Oz$, и модуль его равен модулю проекции на эту ось. Из § 10 известно, что вектор момента определенного значения не имеет, модуль его не бывает равен проекции, а определяется формулой (10.7)

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}.$$

Итак, классическая модель атома с электронным облаком не вполне адекватна действительности.

Пример 12.2. **Расчет магнитного момента атома на основе представлений о непрерывно распределенном в пространстве электрическом заряде.**

Известно, что атом обладает магнитным дипольным моментом. Согласно классической электродинамике движение электрона по орбите эквивалентно замкнутому круговому току, а ток создает магнитный момент, определяемый формулой

$$\vec{M} = I\vec{S},$$

где $I$ — сила тока; $\vec{S}$ — площадка, обтекаемая током (рис. 12.5). Электрон, движущийся по окружности, изображенной на рисунке 12.6, создает магнитный момент:

$$\vec{M} = -\frac{e[\vec{r}\vec{v}]}{2} = -\frac{e\vec{L}}{2\mu},$$

где через $e$ обозначен модуль заряда электрона. Магнитный момент пропорционален механическому (см. ч. III, примеры 8.2, 8.3).

В микромире нельзя рассматривать движение частиц по определенным траекториям в пространстве. Поэтому непосредственно говорить о токе, созданном движением электрона по орбите, не имеет смысла. Но можно воспользоваться представлениями о заряженном и вращающемся электронном облаке. Вектору плотности потока вероятности (12.4) сопоставляется плотность электрического тока:

$$\vec{j}_e = -\frac{e\hbar m}{\mu r \sin\theta} |\psi|^2 \vec{e}_\varphi.$$

Имеется только одна составляющая тока; отличная от нуля проекция

$$j_{e_\varphi} = -\frac{e\hbar m}{\mu r \sin\theta} |\psi|^2;$$

линии тока совпадают с кругами широты.

Разобьем пространство на элементарные трубки тока с сечением $d\sigma$, как это показано на рисунке 12.4. Сила элементарного тока:

$$dI = j_{e_\varphi} d\sigma.$$

Соответствующий элементарный магнитный момент по классической формуле равен току $dI$, умноженному на площадь, охватываемую этим током:

$$dM = -\frac{e\hbar m}{\mu r \sin\theta} |\psi|^2 d\sigma \pi r^2 \sin^2\theta = -\frac{e\hbar m}{2\mu} |\psi|^2 dV,$$

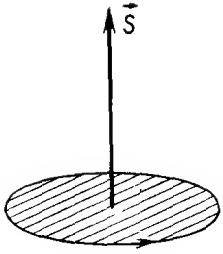



Рис 12.5

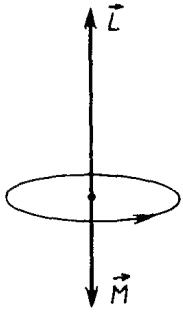



Рис 12 6

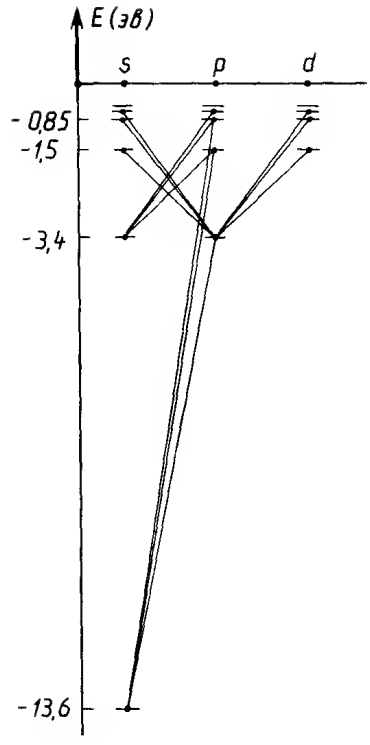



Рис 12 7

где $dV$ — объем злементарной трубки. Заметим, что все магнитные моменты $d\vec{M}$ направлеиы одинаково — по оси $Oz$. Поэтому проекция магнитного момента на ось $Oz$ определяется как сумма $dM$:

$$M = -\int \frac{e\hbar m}{2\mu} |\psi|^2 \, dV.$$

Поскольку интегрирование охватывает все пространство, то интеграл для нормированной волновой функции равеи 1 и

$$M = -\frac{e\hbar m}{2\mu}.$$

Магнитный момеит оказывается пропорциональным механическому моменту:

$$\vec{M} = -\frac{e}{2\mu}\vec{L}$$

в соответствии с классической формулой, приведенной в начале задачи.

Учитывая результаты предыдущего примера, следует ожидать, что решение не является исчерпывающим: магнитный момент не направлен по оси $Oz$. Недостатки решения проистекают от применения классической модели непрерывио распределенного в пространстве заряда. (Последовательное квантово-механическое решение вопроса о магнитном моменте движущегося электроиа дано в следующем пункте.)

**12.3. Орбитальный магнитный момент электрона.** Установим вид оператора магнитного момента движущейся заряженной микрочастицы, опираясь на принцип соответствия. Для этого воспользуемся известным из классической электродинамики выражением для маг-

нитного момента движущейся по круговой траектории частицы с зарядом $-e$ и массой $\mu$:

$$\vec{M} = -\frac{e}{2\mu}\vec{L}. \tag{12.5}$$

(Существенно, что эта формула оказывается справедливой и для распределенного в пространстве электрического заряда электронного облака — см. пример 12.2.)

Оператор магнитного момента получим из формулы (12.5), заменяя вектор $\vec{L}$ оператором момента импульса:

$$\hat{\vec{M}} = -\frac{e}{2\mu}\hat{\vec{L}}. \tag{12.6}$$

Здесь коэффициент $\frac{e}{2\mu}$ носит название *гиромагнитного отношения,* этот параметр имеет размерность $\frac{\text{А}\cdot\text{с}}{\text{кг}}$.

Операторы $\hat{\vec{M}}$ и $\hat{\vec{L}}$ отличаются только постоянным для определенного сорта частиц множителем. Поэтому все, что сказано в § 10, п. 1 о моменте импульса в квантовой механике, относится и к магнитному моменту. Собственные значения соответствующих операторов $\hat{M}^2$ и $\hat{L}^2$, $\hat{M}_z$ и $\hat{L}_z$ пропорциональны друг другу, а собственные функции совпадают. Собственные значения магнитного момента определяются формулами

$$M = \frac{e\hbar}{2\mu}\sqrt{l(l+1)}, \tag{12.7}$$

$$M_z = -\frac{e}{2\mu}\hbar m. \tag{12.8}$$

Из последних формул, в частности, видно, что существует своеобразный квант магнитного момента — наименьшее отличное от нуля значение проекции момента на выделенное в пространстве направление. Для электрона эта́ величина:

$$M_{\text{Б}} = \frac{e\hbar}{2\mu} = 0{,}927\cdot 10^{-23}\ \text{А}\cdot\text{м}^2 \tag{12.9}$$

носит название *магнетона Бора.* Обычно орбитальные магнитные моменты электрона и других микрочастиц, а также собственные их магнитные моменты (см. ниже) выражают в магнетонах. Так, формулы (12.7) и (12.8) для электрона приобретают вид

$$M = M_{\text{Б}}\sqrt{l(l+1)},\ M_z = -M_{\text{Б}}m.$$

Поэтому целесообразно ввести магнетон Бора в формулу оператора магнитного момента электрона (12.6). Вводя $M_{\text{Б}}$ и безразмерный числовой множитель $g_e$ в формулу (12.6), имеем

$$\hat{\vec{M}} = g_e\frac{M_{\text{Б}}}{\hbar}\hat{\vec{L}},$$

где через $g_e$ обозначено орбитальное гиромагнитное отношение. Для электрона $g_e=-1$, для позитрона $g_p=1$.

Если имеем дело не с электронами, а с другими заряженными частицами, например протонами, то масса их больше электронной и магнетон получает иное числовое значение. Часто встречающиеся в физике ядра и элементарных частиц ядерный магнетон:

$$M_я=\frac{e\hbar}{2\mu_p} \tag{12.10}$$

(где $\mu_p$ — масса протона) — на три порядка меньше магнетона Бора.

Итак, в основном за счет магнитных моментов электронов атомы водорода обладают в стационарных состояниях определенными дипольными магнитными моментами. Магнитные моменты многоэлектронных атомов складываются из магнитных моментов отдельных электронов (с учетом спина). Магнитные свойства вещества определяются в основном магнитными свойствами входящих в его состав электронов (об этом подробнее говорится в § 20).

**12.4. Спектр водорода.** Линейчатые спектры испускания (и поглощения) атомов содержат богатую информацию о строении их электронных оболочек. В спектроскопии еще до развития квантовой теории был накоплен обширнейший материал по спектрам атомов, причем точность спектроскопических измерений и тогда уже была велика. В настоящее время она еще повысилась, так что экспериментальные данные по спектрам служат надежным критерием правильности ряда теоретических положений и выводов квантовой теории.

Значения уровней энергии атома водорода зависят от главного квантового числа $n$. Линии спектра соответствуют переходам с излучением и поглощением квантов электромагнитного поля, энергия которых равна разности энергий начального и конечного состояний. В соответствии с (11.7) частоты спектральных линий теоретически определяются формулой

$$\nu_{n_1 n_2}=\frac{Ry}{2\pi\hbar}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right) \quad (n_1<n_2),$$

находящейся в полном соответствии с экспериментальными данными о спектре водорода.

Вся совокупность спектральных линий делится на серии, отличающиеся значениями $n_1$. При $n_1=1$ получаем серию Лаймана. Частоты линий в серии даются формулой

$$\nu=\frac{Ry}{2\pi\hbar}\left(1-\frac{1}{n^2}\right), \quad n=2,\ 3,\ \ldots$$

Наименьшую частоту имеет головная линия $L_\alpha$ (Лайман-альфа):

$$\nu_\alpha=\frac{3Ry}{8\pi\hbar}.$$

По мере роста $n$ частота увеличивается, при этом линии сближа-

ются. При больших $n$ фактически все линии сливаются с пределом серии, который соответствует частоте:

$$\nu_{max}=\frac{Ry}{2\pi\hbar}.$$

Из опыта известно, что к пределу серии примыкает участок непрерывного спектра. Линии серии Лаймана лежат в ультрафиолетовом диапазоне шкалы электромагнитных волн.

Рассмотрим, каким квантовым переходам отвечает серия Лаймана. Как будет показано далее, разрешены не все переходы между стационарными квантовыми состояниями. Ограничений на изменение главного квантового числа нет: разность $\Delta n=n_2-n_1$ может быть любой. В отношении орбитального квантового числа действует запрет на любые переходы, кроме тех, для которых $\Delta l=l_2-l_1=\pm 1$. Магнитное квантовое число должно оставаться прежним или изменяться только на единицу: $\Delta m=m_2-m_1=0,\ \pm 1$.

Все состояния делятся на группы, которые называются термами. Терм объединяет состояния со сходными свойствами. Для водорода в соответствии с указанными выше правилами отбора в термы включают состояния с одним и тем же $l$. Соответственно говорят о $s$-, $p$-, $d$-термах и т. д. Переходы возможны только между соседними термами.

Квантовые состояния электрона обозначаются символом, состоящим из числа, равного $n$, и буквы, обозначающей значение $l$, например $1s$, $3d$, $2p$. Если атомы не находятся в магнитном поле, то уровни энергии вырождены по квантовому числу $m$, и поэтому оно существенной роли в спектроскопии не имеет и в обозначении состояний обычно опускается. Расположение самых нижних по энергии квантовых состояний атома водорода иллюстрируется диаграммой 12.7.

Диаграмма очень наглядно показывает, каким квантовым переходам соответствуют те или иные линии в спектре. Серия Лаймана образуется переходами $np-1s$. Другая серия — серия Бальмера — описывается формулой

$$\nu=\frac{Ry}{2\pi\hbar}\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{n^2}\right),\ n=3,\ 4,\ \ldots$$

Ей отвечают переходы $ns-2p$, $np-2s$ и $nd-2p$.

Понятно, что спектры водородоподобных систем обнаруживают сериальные закономерности, характерные для водорода; они подчиняются формуле

$$\nu'=\frac{Ry'}{2\pi\hbar}\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right).$$

Частоты здесь отличаются от водородных, так как при расчете постоянной $Ry'$ используются значения иной, нежели у водорода, приведенной массы $\mu$ и заряда ядра $Z$ (см. § 11, п. 4).

## § 13. СПИН ЭЛЕКТРОНА

**13.1. Гипотеза о спине электрона.** Многочисленные экспериментальные данные показывают, что магнитный момент атомов не сводится к одним орбитальным магнитным моментам электронов. Необходимо допустить существование собственного момента импульса электрона — спина — и пропорционального ему собственного магнитного момента. (Далее будем применять обозначения $\vec{S}$ и $\vec{M}_S$.)

Уже при изучении атома водорода и водородоподобных систем необходимо учесть взаимодействие между орбитальными и спиновыми магнитными моментами, а для многоэлектронных атомов роль этих взаимодействий очень существенна. Энергия спин-орбитального взаимодействия невелика, и поэтому оно не изменяет общей картины найденных ранее уровней энергии. Небольшие поправки к значениям энергии, возникающие при учете магнитных взаимодействий, зависят от взаимной ориентации магнитных моментов. Если последняя осуществляется несколькими способами, то каждый уровень для состояний с $l \neq 0$ распадается на соответствующее число близких подуровней. Это приводит к расщеплению спектральных линий на несколько компонент. Опыт показывает, что линии серии Лаймана (и аналогичных серий водородоподобных систем: иона $He^+$, щелочных атомов и др.) распадаются на пары-дублеты, что приводит к выводу о двояко ориентирующемся спиновом магнитном моменте.

В связи с изучением тонкой структуры спектров Уленбек и Гаудсмит выдвинули в 1925 г. гипотезу о существовании у электрона собственного механического и магнитного момента — *спина*. Наличие *спина* подтверждается также результатами известных опытов Штерна и Герлаха (1922). Если пропустить через неоднородное магнитное поле пучок атомов водорода, находящихся в основном ($1s$) состоянии, то он разделяется на два пучка. Поскольку в состоянии $1s$ орбитальный момент равен нулю, то весь магнитный момент атома сводится к спиновому магнитному моменту электрона. (Магнитный спиновый момент протона и других ядер много меньше электронного и не сказывается на результатах эксперимента. Ради точности заметим, что первые опыты Штерна и Герлаха проводились с серебром. В атомах серебра не скомпенсирован спин последнего, оптического, электрона, который находился в $s$-состоянии.) Экспериментты доказывают, таким образом, и существование спина, и его способность к двойной ориентации по отношению к направлению внешнего магнитного поля.

Измерения в опытах Штерна и Герлаха позволили найти величину проекции спинового магнитного момента. Она оказалась равной магнетону Бора. В других наблюдениях (например, опыты Эйнштейна и де Гааза, которые мы здесь не описываем) было установлено, что гиромагнитное отношение для спина вдвое больше, чем орбитальное (см. § 12, п. 3). Спиновое безразмерное гиромагнитное отношение для электрона равно $-2$.

Наличие спина не связано с каким-нибудь движением частицы в пространстве. Поэтому о спине нельзя получить сведений из урав-

нения Шредингера, которое пригодно, строго говоря, для описания только бесспиновых частиц.

В настоящее время как сам спин, так и все его характеристики могут быть получены теоретически из релятивистского квантового уравнения Дирака (см. § 26). Но в рамках нерелятивистской квантовой механики представление о спине вводится как дополнительное положение, поэтому в нашем курсе опора на экспериментальные данные необходима.

Иногда электрон представляют для наглядности в виде шарика-волчка, вращающегося вокруг оси, проходящей через центр масс. С принципиальной стороны эта модель является неверной. Такие элементарные частицы, как электрон, по современным данным считают бесструктурными и точечными, а поэтому их спиновые свойства не могут иметь наглядного толкования. Появление спина у элементарной частицы — квантово-релятивистский эффект того же плана, как энергия покоя. Спин такой же неотъемлемый атрибут частицы, как ее масса или заряд.

Однако в отличие от массы или заряда понятие о спине является чисто квантовым и не имеет каких-либо классических аналогов. При переходе в классическую область спин исчезает уже потому, что модуль вектора $\vec{S}$ по порядку величины равен $\hbar$, а в классической области следует положить $\hbar=0$. (Орбитальный момент импульса $L \sim l\hbar$. В классическом пределе $\hbar \to 0$, а $l \to \infty$, поэтому произведение $l\hbar$ остается конечным.) Поэтому попытки свести спин электрона к каким-то собственным его вращениям оказались бесплодными.

В настоящее время твердо установлено наличие спина не только у электронов, но и у большинства других элементарных частиц. Величина спина и связанное с ней число различных ориентировок по отношению к некоторой оси могут быть различными.

**13.2. Математическое описание спина электрона.** В квантовую теорию динамические переменные входят через соответствующие им операторы. Для описания спина используются оператор спина $\widehat{\vec{S}}$ и операторы его проекций $\widehat{S}_x$, $\widehat{S}_y$ и $\widehat{S}_z$.

Даже не рассматривая явный вид указанных операторов, можно многое узнать о спине из правил их коммутации. Для спинового момента, как и для орбитального момента импульса, выполняются соотношения

$$[\widehat{S}_x, S_y]=i\hbar\widehat{S}_z,\ [\widehat{S}_y, \widehat{S}_z]=i\hbar\widehat{S}_x,\ [\widehat{S}_z, \widehat{S}_x]=i\hbar\widehat{S}_y. \qquad (13.1)$$

Поэтому не существует состояний с определенным (по модулю и направлению в пространстве) вектором спина. Из соотношений (13.1) следует, что коммутируют операторы $\widehat{S}^2$ и $\widehat{S}_z$. Следовательно, возможны состояния с заданной величиной модуля спина и его проекции на одну ось $-Oz$. Из правил коммутации вытекают также условия квантования:

$$S=\hbar\sqrt{s(s+1)}, \qquad (13.2)$$

$$S_z=\hbar m_s,\ m_s=s,\ s-1,\ \ldots,\ -s, \qquad (13.3)$$

где $s$ — спиновое квантовое число; $m_s$ — квантовое число проекции спина.

Между значением спинового числа $s$ и числом проекций спина существует то же соотношение, что и для орбитального момента: $m_s$ принимает $2s+1$ значение. Но из опытов Штерна и Герлаха известно, что число проекций равно двум, т. е.

$$2s+1=2,$$

откуда для электрона

$$s=\frac{1}{2}, \tag{13.4}$$

а квантовое число $m_s$ принимает только два значения:

$$m_s=\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}.$$

Итак, для электрона спиновый механический момент в соответствии с выражениями (13.2) и (13.4) выражается формулой

$$S=\hbar\frac{\sqrt{3}}{2}, \tag{13.5}$$

а проекция его на ось $Oz$:

$$S_z=\frac{\hbar}{2},\ -\frac{\hbar}{2}, \tag{13.6}$$

что соответствует в рамках векторной модели двум возможным ориентациям вектора спина. При $m_s=\frac{1}{2}$ условно говорят, что спин направлен по оси $Oz$, вверх, а при $m_s=-\frac{1}{2}$ — против оси $Oz$, вниз (рис. 13.1).

Для нахождения магнитного момента электрона следует считать, что связь между операторами механического и магнитного моментов общая для орбитального движения и спина:

$$\widehat{\vec{M}}_s=-2\frac{M_Б}{\hbar}\widehat{\vec{S}},\ (\widehat{\vec{M}}_s)_z=-2\frac{M_Б}{\hbar}\widehat{S}_z. \tag{13.7}$$

Отсюда для проекции спинового магнитного момента электрона имеем формулу

$$(M_s)_z=\pm\frac{e\hbar}{2\mu}=\pm M_Б. \tag{13.8}$$

(Теоретическое значение магнитного момента электрона, рассчитанное в квантовой электродинамике и подтвержденное экспериментом, таково:

$$(M_s)_z=\pm 1{,}00116M_Б.)$$

Спин, как говорилось выше, присущ не только электронам, но и другим микрочастицам — ядрам, элементарным частицам. Специфическая особенность спина состоит в том, что спиновое число

$s$ для разных микрочастиц принимает как целые, так и полуцелые значения:

$$s=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \ldots$$

Частицы с полуцелым спином — $s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ и т. д.— объединяются в один класс и называются *фермионами*. Частицы с целым спином — $s=0, 1, 2, \ldots$— относятся к *бозонам*. (Как правило, спиновое число невелико по сравнению с единицей.)

Как для целых, так и для полуцелых значений $s$ квантовое число проекции спина $m_s$ изменяется от $s$ до $-s$ с шагом, равным 1.

Для всех микрочастиц справедливы формулы (13.2), (13.3), выражающие механический спиновый момент через спиновые квантовые числа. Что же касается магнитного момента, то гиромагнитные отношения других частиц могут быть иными, нежели для электрона, а магнетон при этом зависит от массы частицы.

Квантовое число проекции спина $m_s$ должно включаться в набор квантовых чисел, задающих состояние электрона. Так, при движении частицы в центрально-симметричном поле для волновых функций при учете спина следует использовать выражение

$$\psi_{nlmm_s}(r,\ \Theta,\ \varphi)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\Theta,\ \varphi)\,U_{m_s}, \qquad (13.9)$$

где $U_{m_s}$ — так называемая спиновая функция, вид которой при элементарном рассмотрении ряда важных вопросов может оставаться нераскрытым (см. § 13, п. 3).

Функция (13.9) описывает квантовое состояние электрона с определенной энергией $E$, орбитальным моментом импульса $L$; его проекцией $L_z$ и проекцией спина $S_z$ (и, конечно, с определенным спином $S$). Эти величины образуют полный набор для электрона в атоме водорода. Поэтому задание квантовых чисел $n$, $l$, $m$ и $m_s$ полностью определяет квантовое состояние электрона в атоме.

Энергия атома водорода в приближении, когда не учитывается магнитное взаимодействие, от спина не зависит. Поэтому уровни энергии, задаваемые формулой (11.7), имеют дополнительное вырождение по ориентации спина.

Уточняется и число различных состояний атома при заданном $n$ (§ 11, п. 3). Конкретному значению энергии $E_n$ соответствует $2n^2$ различных квантовых состояний электрона, отличающихся квантовыми числами $l$, $m$ и $m_s$. При заданных $n$ и $l$ имеется $2(2l+1)$ состояний с различными $m$ и $m_s$.

* * *

Подводя общий итог решению водородной задачи, можно заметить, что атом водорода уже рассматривался в полуклассической-полуквантовой теории Бора. Но с помощью последовательной теории, основанной на уравнении Шредингера, мы получили более глубокую и исчерпывающую информацию о строении и свойствах атома.

Существенно, что часть положений Бора подтвердилась: о стационарных состояниях, об уровнях энергии и их квантовании. Однако теперь это не постулированные положения, а выводы квантовой механики, результаты решения одной из ее задач.

**13.3. Спиновые операторы и функции.** До сих пор явный вид оператора спина не использовался. В соответствии с двумя значениями проекции спина на ось $Oz$, операторы спина могут быть выражены через матрицы Паули:

$$\sigma_0=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\ \sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\ \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\ \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{13.10}$$

Спиновые операторы связаны с матрицами (13.10) соотношениями

$$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}=\frac{\hbar}{2}(\sigma_x\vec{i}+\sigma_y\vec{j}+\sigma_z\vec{k}),$$
$$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_x,\ \hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y,\ \hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_z,\ \hat{S}^2=\frac{3\hbar^2}{4}\sigma_0. \tag{13.11}$$

Нетрудно убедиться, что для операторов (13.11) справедливы формулы (13.1) вместе со всеми вытекающими из них следствиями (13.2) ... (13.6).

Спиновые функции — это математические выражения, описывающие спиновое состояние электрона. Их физический смысл и свойства определяются, с одной стороны, общими положениями квантовой механики о функциях состояния. С другой стороны, они не могут быть обычными функциями от координат частицы, так как спин не связан с движением частиц в пространстве. Спиновые операторы задаются через матрицы. Поэтому и спиновые функции также представляются в виде матриц. В более полных (нежели наш) курсах ([3], [21] и др.) в теории представлений показано, что матричное представление операторов и функций состояния, в сущности, не является чем-то особенным, наоборот, такой математический аппарат удобен для описания многих квантовых систем. При общем подходе спин не выделяется среди других величин. Но сейчас придется о спиновых функциях говорить отдельно. Разъясним только те стороны описания спина, с которыми встретимся в курсе ниже.

Спиновая функция $u$ — матрица-столбец:

$$u=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix},$$

где $c_1$ и $c_2$ — некоторые комплексные числа. Действие операторов (13.10) на такую функцию производится по правилу умножения матриц. В частности, имеем

$$\hat{S}^2u=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}.$$

Таким образом, любая спиновая функция есть собственная функция оператора $\hat{S}^2$, принадлежащая единственному собственному значению $\frac{3\hbar^2}{4}$. Уравнение

$$\hat{S}_zu=S_zu$$

в матричной форме имеет вид

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=S_z\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}.$$

Перемножая матрицы, получаем

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}c_1\\-c_2\end{pmatrix}=S_z\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}.$$

Отсюда видно, что в общем случае спиновая функция не является собственной для $\hat{S}_z$.

Спиновая функция

$$u=\begin{pmatrix}c_1\\0\end{pmatrix}$$

описывает состояние с $S_z=\frac{\hbar}{2}$, а функция

$$u=\begin{pmatrix}0\\c_2\end{pmatrix}$$

— состояние с $S_z=-\frac{\hbar}{2}$.

Введем функцию $u^+$, эрмитово сопряженную с функцией $u$. Это матрица-строка:

$$u^+=(c_1^*c_2^*).$$

Спиновые функции нормируются условием

$$u^+u=1, \tag{13.12}$$

или

$$(c_1^*c_2^*)\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=|c_1|^2+|c_2|^2=1.$$

Нормированные спиновые функции, описывающие состояние с положительной и отрицательной ориентациями спина, обозначим через $u(m_s)$:

$$u\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad u\left(-\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{13.13}$$

Спиновые операторы являются самосопряженными или эрмитовыми. (В матричном представлении эрмитово сопряженный оператор изображается эрмитово сопряженной — транспонированной и комплексно сопряженной — матрицей.) Поэтому их собственные значения действительны, а собственные функции образуют полную ортонормированную систему.

Функции $u_1$ и $u_2$ ортогональны, если

$$u_1^+u_2=0. \tag{13.14}$$

Легко проверить, что функции $u\left(\frac{1}{2}\right)$ и $u\left(-\frac{1}{2}\right)$ удовлетворяют равенству (13.14). Поэтому произвольная спиновая функция может быть разложена по собственным функциям оператора $\hat{S}_z$:

$$\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=c_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+c_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

или

$$u=c_1u\left(\frac{1}{2}\right)+c_2u\left(-\frac{1}{2}\right).$$

По общим правилам квантовой механики $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ определяют вероятность обнаружения частицы с той или иной ориентацией спина. Так как возможны только две ориентации, то в соответствии с условием нормировки (13.12) $|c_1|^2+|c_2|^2=1$.

**13.4. Описание квантового состояния электрона с учетом его спина.** Функция состояния электрона должна быть такой, чтобы с ее помощью можно было найти вероятность обнаружения частицы в данной точке с определенной ориентацией вектора спина. При этом следует учесть, что в общем случае движения в произвольных силовых полях направление спинового момента импульса зависит от положения микрочастицы в пространстве. Задать вероятность положения в пространстве и ориентацию спина можно, если квантовое состояние электрона описывать матрицей-столбцом:

$$\psi(x,\ y,\ z)=\begin{pmatrix}\psi_1(x,\ y,\ z)\\\psi_2(x,\ y,\ z)\end{pmatrix}. \tag{13.15}$$

Эта запись эквивалентна следующей:

$$\psi(x, y, z)=\psi_1(x, y, z)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\psi_2(x, y, z)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Теперь видно, что квадраты модулей составляющих $\psi_1$ и $\psi_2$ могут интерпретироваться как плотности вероятности для местоположения частицы при положительной или отрицательной проекции спина. На функцию состояния (13.15) накладывается условие нормировки:

$$\int \psi^+\psi dV=\int(\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2)\,dV=1. \qquad (13.16)$$

В некоторых задачах удобно вместо матрицы-столбца (13.15) использовать одну функцию

$$\psi=\psi(x, y, z, m_s), \qquad (13.17)$$

включив в число ее аргументов так называемую спиновую переменную $m_s$. Она принимает только два значения: $m_s=\pm\frac{1}{2}$. Очевидно, следует положить

$$\psi\left(x, y, z, \frac{1}{2}\right)=\psi_1(x, y, z),\ \psi\left(x, y, z, -\frac{1}{2}\right)=\psi_2(x, y, z).$$

Тем самым устанавливается физический смысл функции состояния (13.17).

Матрица (13.15) находится из решения релятивистского квантового уравнения Дирака (см. § 26). В нерелятивистском пределе для определения функции состояния (13.15) используется так называемое уравнение Паули. Мы не будем изучать эти уравнения, ограничиваясь вопросами, которые рассматриваются на базе уравнения Шредингера.

Это возможно в тех случаях, когда движение нерелятивистское и ориентация спина не зависит от положения электрона в пространстве. В таком случае функция состояния может быть представлена в виде произведения координатной и спиновой функций:

$$\Psi=\varphi(x, y, z)\,u=\varphi(x, y, z)\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}. \qquad (13.18)$$

Сомножитель, зависящий от координат, находится из решения уравнения Шредингера. Это обычная волновая функция.

Из условия (13.16) следует условие нормировки функций состояния (13.18):

$$(c_1^*c_1+c_2^*c_2)\int\varphi^*\varphi dV=1.$$

Состояние электрона со спином вверх описывается функцией

$$\Psi=\varphi(x, y, z)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

а со спином вниз —

$$\Psi = \varphi(x, y, z)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Оба случая могут быть охвачены одной формулой

$$\psi = \varphi(x, y, z)\, u(m_s),$$

откуда и следует, что квантовое число проекции спина $m_s$ включается в набор квантовых чисел, задающих состояние электрона (так мы поступили ранее, в § 13, п. 2). Например, электрон в центрально-симметричном кулоновском поле описывается функцией (13.9)

$$\Psi_{nlmm_s}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)\, u(m_s).$$

При использовании этой функции состояния следует учитывать, что спиновые операторы действуют только на спиновую функцию $u(m_s)$, т. е. на один из сомножителей в выражении функции. В свою очередь операторы, действующие на пространственные переменные, не затрагивают спиновой части функции состояния. Их следует применять только к сомножителям, зависящим от координат. Поэтому $\widehat{S}^2$ и $\widehat{S}_z$ коммутируют с операторами $\widehat{L}^2$, $\widehat{L}_z$ и гамильтонианом (10.14). Волновая функция (13.17) для электрона в этом атоме водорода является собственной функцией всех пяти операторов.

### Методические указания и рекомендации

**1.** Задача об атоме водорода является для элементарного курса квантовой механики центральной; в процессе ее решения студенты знакомятся с решением научной проблемы, которое всего лишь полвека тому назад было достигнуто в результате работ гениальных ученых, определивших прогресс физической науки. Если многие вопросы из предыдущих глав требуют усвоения на уровне запоминания и применения (операторы, основные положения и т. д.), то здесь речь идет прежде всего о понимании и воспроизведении (при запоминании принципиальных конечных результатов).

Специфичен методический вопрос о выкладках при решении водородной задачи. Так как выполнить их подробно на лекциях невозможно — потеряется логическая нить главного,— то часть выкладки (например, все преобразования радиального уравнения до подстановки степенного ряда) желательно перенести на практические занятия.

При изучении орбитального магнитного момента атома мы ввели в курс соответствующий оператор, так как имеющее место в учебной литературе изложение вопроса на основе классической по существу модели электронного облака не исчерпывающе (см. пример 12.2).

Понятие о спине вводится в элементарном курсе с опорой на эксперимент как дополнительное положение к уравнению Шредингера. Изучение спина может быть выполнено без раскрытия вида его операторов и функций, но предусмотрена возможность и углубленного варианта (см. § 13, п. 3). В любом случае разъяснение единства математического описания моментов импульса используется, т. е. свойства орбитальных моментов переносятся на спиновые.

По спину уместно проведение семинарского занятия с выступлениями студентов.

**II.** При изучении материала студентам полезно контролировать усвоение знаний, отвечая на вопросы, выполняя задания и упражнения:

— В чем специфика квантово-механического момента импульса по сравнению с классическим? Законспектируйте в краткой форме основные сведения об операторах момента импульса и его собственных функциях. Назовите сохраняющиеся и имеющие определенное значение величины при движении частицы в кулоновском поле. Выделите основные этапы решения задачи об атоме водорода. Примените результаты решения для описания пространственной структуры атома. Сделайте рисунки электронных облаков ряда состояний атома водорода, соединяя в них радиальное и угловое распределения вероятности.

— Раскройте понятие о спине как совокупности определенных свойств элементарной частицы. Сопоставьте формулы спинового и орбитального механического моментов. Как связан магнитный спиновый момент с зарядом (для электрона)? Что такое гиромагнитное отношение и как его можно выразить через другие величины, характеризующие механические и магнитные свойства частицы? Выпишите и раскройте смысл различных конкретных наборов квантовых чисел электрона в атоме (например, (1,0, 0, 1/2), (2, 1, —1, —1/2) и т. д.). Выполните упражнения к главе.

## Упражиение IV

1. Найдите выражения (10.3) операторов проекций момента импульса в сферических координатах.

Решение.

Воспользуемся выражением оператора $\nabla$ в сферических координатах:

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

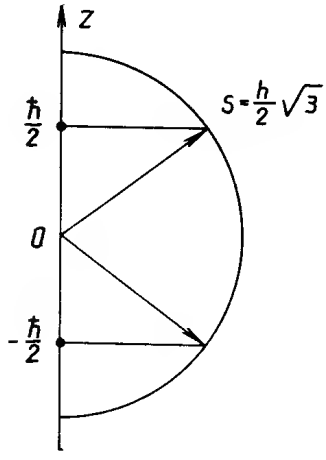



Рис 13 1

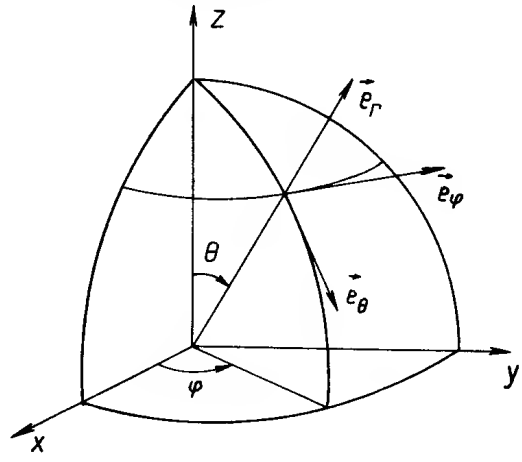



Рис 13.2

У нас

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar[\vec{r}\,\nabla] = -i\hbar r[\vec{e}_r\nabla] =$$

$$= i\hbar\left\{[\vec{e}_r\vec{e}_\theta]\frac{\partial}{\partial\theta} + [\vec{e}_r\vec{e}_\varphi]\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} = -i\hbar\left\{\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$$

(рис. 13.2). Остается спроектировать вектор $\hat{\vec{L}}$ на оси декартовых координат.

**2.** Используя результаты предыдущей задачи, найдите оператор $\hat{L}^2$ в сферических координатах.

**3.** По формулам (10.8)...(10.9) найдите все сферические функции при $l \leqslant 2$.

**4.** Непосредственной подстановкой в уравнение (10.6) покажите, что функции (10.11) являются его решениями.

**5.** Прямым вычислением покажите, что функции (10.11) удовлетворяют условию нормировки (10.10).

**6.** Проверьте выполнение условий попарной ортогональности функций (10.11).

**7.** Выполните переход от уравнения (11.2) к уравнению (11.4).

**8.** Сделайте подстановку (11.13) в уравнение (11.4).

**9.** Сделайте зарисовку электронного облака для состояний: $n=1$, $l=0$, $m=0$; $n=2$, $l=0$, $m=0$; $n=2$, $l=1$, $m=\pm 1$.

**10.** Найдите радиальные волновые функции (11.11) с помощью формулы (11.9).

**11.** Покажите, что операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ коммутируют.

Р е ш е н и е.

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \text{ и } [\hat{L}^2\hat{L}_z] = [\hat{L}_z^2\hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2\hat{L}_z] + [L_z^2 L_z].$$

Последнее слагаемое равно нулю, так как любой оператор всегда коммутирует сам с собой и с любой своей степенью. Для вычисления первых двух слагаемых используем равенство $\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x = -i\hbar L_y$. Умножим его слева и справа на $\hat{L}_x$. Получим

$$\hat{L}_x\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_x = -i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y$$

и

$$\hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_x = -i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x.$$

Складывая два последних выражения, имеем

$$[\hat{L}_x^2\hat{L}_z] = -i\hbar[\hat{L}_x\hat{L}_y] = \hbar^2\hat{L}_z.$$

Аналогичным приемом доказывается, что

$$[\hat{L}_y^2\hat{L}_z] = -\hbar^2\hat{L}_z.$$

Отсюда следует искомый результат.

**12.** Покажите, что для операторов $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ справедливы коммутационные соотношения

$$[\hat{L}_+\hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z,\ [\hat{L}_z\hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm.$$

**13.** Покажите, что

$$\widehat{L}_z \widehat{L}_{\pm} \psi_m = \hbar (m \pm 1) \widehat{L}_{\pm} \psi_m, \tag{1}$$

где $\psi_m$ — собственная функция оператора $\widehat{L}_z$, принадлежащая собственному значению $\hbar m$. Заметим, что из (1) следует

$$\widehat{L}_{\pm} \psi_m = \psi_{m \pm 1}.$$

Указание. Воспользоваться результатами задачи 12.

**14.** Пользуясь данными задач 12 и 13, покажите, что из правил коммутации проекций момента импульса (10.2) вытекает условие квантования (10.7).

Решение.

$$L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 \geqslant 0.$$

Поэтому

$$-\sqrt{L^2} \leqslant L_z \leqslant \sqrt{L^2}.$$

Обозначим через $\hbar l$ наибольшее возможное значение $L_z$. Пусть $\psi_l$ — соответствующая собственная функция оператора $\widehat{L}_z$. Согласно данным задачи 13

$$\widehat{L}_+ \psi_m = \psi_{m+1}.$$

Очевидно,

$$\widehat{L}_+ \psi_l = 0,$$

так как состояний с $m > l$ нет. Подействуем на обе части последнего равенства оператором $\widehat{L}_-$:

$$\widehat{L}_- \widehat{L}_+ \psi_l = 0.$$

Используя определения операторов $\widehat{L}_-$ и $\widehat{L}_+$ (см. задачу 12), имеем

$$(\widehat{L}^2 - \widehat{L}_z^2 - \widehat{L}_z) \psi_l = 0.$$

Функция $\psi_l$ — собственная функция как для оператора $\widehat{L}_z$, так и для оператора $\widehat{L}^2$, так как они коммутируют. Поэтому получаем

$$(L^2 - \hbar^2 l^2 - \hbar l) \psi_l = 0.$$

Отсюда следует

$$L^2 = \hbar^2 l (l+1).$$

**15.** Покажите, что операторы (13.10) являются самосопряженными.

**16.** Покажите, что операторы проекций спина (13.11) удовлетворяют условиям коммутации (13.1).

**17.** Вычислите оператор $\widehat{S}^2$ через операторы проекций $\widehat{S}_x$, $\widehat{S}_y$ и $\widehat{S}_z$.

**18.** Покажите, что операторы $\widehat{S}^2$ и $\widehat{S}_z$ коммутируют.

# ГЛАВА V. МЕХАНИКА СИСТЕМЫ МИКРОЧАСТИЦ

Задача об атоме водорода сведена в предыдущей главе к задаче на движение одной частицы в силовом поле. Однако уже атом гелия, состоящий из ядра и двух электронов, только к одночастичной задаче не сводится. И хотя результаты, полученные при решении водородной задачи, используются при расчете многоэлектронных атомов, к ним должны быть применены положения и законы механики системы микрочастиц. К изучению их мы и приступаем в настоящей главе.

## § 14. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ПРИНЦИПЫ МЕХАНИКИ СИСТЕМЫ МИКРОЧАСТИЦ

**14.1. Волновая функция системы частиц. Операторы физических величии, характеризующих систему в целом.** Квантовая механика системы частиц строится путем обобщения основных понятий и законов механики одной частицы. При этом сохраняется в основных чертах развитый ранее математический аппарат.

Состояние системы описывается волновой функцией

$$\psi = \psi(x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_N,\ t),$$

где через $x_i$ обозначена совокупность трех координат точки пространства, в *которой может оказаться i-я микрочастица.* В случае системы микрочастиц определение (2.1) для вероятности нахождения одной частицы в элементе объема около точки с координатами $x$, $y$, $z$:

$$dW = \psi^*(x)\,\psi(x)\,dV$$

обобщается на все частицы, входящие в систему. *Вероятность того, что частица 1 находится в элементе объема* $dV_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ *около точки с координатами* $x_1$, $y_1$ и $z_1$ *и одновременно с этим частица 2 находится в элементе объема* $dV_2 = dx_2 dy_2 dz_2$ *около точки с координатами* $x_2$, $y_2$ *и* $z_2$ *и т. д., задается формулой*

$$dW = \psi^*(x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_N,\ t)\,\psi(x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_N,\ t)\,dV_1 dV_2,\ \ldots,\ dV_N.$$

Таким образом, речь идет о вероятности *конфигурации системы,* т. е. того или иного расположения ее частиц в заданный момент времени.

Из сказанного должно быть также ясно, что, как и ранее, в механике частицы, координаты $x_i$, $y_i$, $z_i$ не есть координаты $i$-й частицы — это координаты любой точки пространства, но относятся они к описанию $i$-й частицы, к нахождению ее места в общей конфигурации системы.

Обычный вид имеет условие нормировки:

$$\int |\psi|^2 dV_1 dV_2,\ \ldots,\ dV_n = 1.$$

Но если в механике частицы этот интеграл сводился к трехкратному, то теперь он $3N$-кратный.

В механике системы частиц используют операторы, относящиеся к отдельным частицам, например оператор координаты $\hat{x}_i$, оператор импульса $\hat{\vec{p}}_i$ и др. Такие операторы можно называть *одночастичными*. При умножении на волновую функцию каждый одночастичный оператор действует только на координаты своей частицы. Поэтому операторы, относящиеся к разным частицам, коммутируют между собой.

Операторы величин, характеризующих систему в целом, найдем по принципу соответствия с классической механикой; соотношения между операторами повторяют классические формулы. Оператор *импульса системы* имеет вид

$$\hat{\vec{p}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}}_i. \tag{14.1}$$

Оператор *момента импульса системы* определяется как сумма:

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{L}}_i. \tag{14.2}$$

Запишем еще оператор Гамильтона для системы взаимодействующих частиц, находящихся во внешнем поле:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + \sum_{i=1}^{N} U_i(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^{N} \sum_{k \neq i}^{N} U_{ik}(x_i x_k). \tag{14.3}$$

Первое слагаемое есть кинетическая энергия частиц, второе — потенциальная энергия их во внешнем поле, третье слагаемое выражает потенциальную энергию взаимодействия частиц друг с другом.

Основное уравнение квантовой механики для системы частиц — уравнение Шредингера — имеет тот же вид, что и для одной частицы, если использовать операторную форму записи:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \tag{14.4}$$

Это очень сложное уравнение, где $\hat{H}$ имеет вид (14.3).

На систему частиц распространяются *постулат о допустимых значениях физических величин, о вероятностях отдельных значений, принцип суперпозиции, правило вычисления средних.* Справедливы и полученные ранее сведения о *стационарных состояниях* и *законах сохранения физических величин.*

В системе необходимо учитывать спин частиц. Используются операторы спина отдельных частиц $\hat{\vec{S}}_i$ и вводится *оператор спина системы*

$$\hat{\vec{S}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{S}}_i. \tag{14.5}$$

Спиновые моменты дают вклад в полный момент импульса системы. Обозначая его оператор через $\hat{\vec{J}}$, имеем

$$\hat{\vec{J}}=\sum_{i=1}^{N}\hat{\vec{L}}_i+\sum_{k=1}^{N}\hat{\vec{S}}_k. \tag{14.6}$$

Волновая функция при учете спина зависит как от пространственных, так и от спиновых переменных. Для системы из электронов

$$\Psi=\varphi(x_1, x_2, \ldots, x_N; m_{s_1}, m_{s_2}, \ldots, m_{s_N}),$$

где $m_{s_i}$ — спиновые переменные отдельных частиц, принимающие значения $\pm 1/2$. Для нас важен случай, когда магнитными взаимодействиями можно пренебречь. Тогда

$$\Psi=\varphi(x_1, x_2, \ldots, x_N)\, u(m_{s_1}, m_{s_2}, \ldots, m_{s_N}). \tag{14.7}$$

Координатная часть волновой функции находится из решения уравнения Шредингера (14.4). Физический смысл спинового множителя заключается в том, что он позволяет определить вероятность той или иной ориентации спина всех частиц в системе.

**14.2. Задача двух частиц.** В классической механике движение системы двух взаимодействующих материальных точек может быть сведено к равномерному перемещению в пространстве центра масс системы и относительному движению некоторой точки в системе центра масс. При изучении относительного движения рассматривается изображающая точка, масса которой равна приведенной массе системы: $\mu=\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ (см. ч. I, § 15, п. 1).

Сходные результаты могут быть получены и в квантовой теории. Волновая функция системы двух частиц зависит от координат $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ обеих частиц. Оператор Гамильтона найдем с помощью принципа соответствия между классической и квантовой механикой.

Энергия аналогичной классической системы равна сумме кинетической энергии частиц и потенциальной энергии их взаимодействия:

$$E=T_1+T_2+U(r).$$

(Последнее слагаемое зависит только от расстояния между частицами.) Соответственно оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2+U(r).$$

Запишем уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m^2}\Delta_2+U(r)\right]\psi(\vec{r}_1\vec{r}_2)=E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \tag{14.8}$$

где $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ — радиус-векторы точек пространства для обеих частиц.

Перейдем в уравнении к новым переменным:

$$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2, \tag{14.9}$$

$$\vec{r}_c=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}, \tag{14.10}$$

где $\vec{r}_c$ — радиус-вектор центра масс системы.

Заметим, что

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_1}=\frac{\partial\psi}{\partial x_c}\frac{\partial x_c}{\partial x_1}+\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1}=\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial\psi}{\partial x_c}+\frac{\partial\psi}{\partial x},$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_2}=\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial\psi}{\partial x_c}-\frac{\partial\psi}{\partial x},$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}=\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x_c^2}+\frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial x_c}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}=\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x_c^2}-\frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial x_c}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

Отсюда видно, что

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}=-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_c^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

Поэтому уравнение (14.8) в новых переменных принимает вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\Delta_c-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+U(r)\right]\psi(\vec{r}_1\vec{r}_c)=E\psi(\vec{r}_1\vec{r}_c).$$

Подстановка

$$\psi(\vec{r}_1\vec{r}_c)=\varphi(\vec{r}_c)\,f(\vec{r})$$

позволяет разделить переменные. Полагая $E=E_1+E_2$, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\Delta_c\varphi(\vec{r}_c)=E_1\varphi(\vec{r}_c), \tag{14.11}$$

$$\Delta f+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E_2-U(\vec{r})]f(\vec{r})=0. \tag{14.12}$$

Уравнение (14.11) описывает поступательное движение системы как единого целого. Система уподобляется одной частице с массой, равной сумме масс $m_1+m_2$, положение этой точки в пространстве совпадает с центром масс.

Уравнение (14.12) описывает движение изображающей частицы с массой, равной приведенной, относительно центра масс. Энергия $E_2$, полученная в результате решения уравнения (14.11), отличается от энергии движения одной частицы относительно неподвижного силового центра только тем, что вместо $m$ в нее входит $\mu$ — приведенная масса. (Этим мы пользовались ранее при решении задачи об атоме водорода.) Что касается волновой функции $f(\vec{r})$, то она записана в системе центра масс для изображающей точки. Переход к функции состояния реальных частиц выполняется с учетом связей (14.9) и (14.10). В то же время $f(\vec{r})$ непосредственно описывает движение первой точки *относительно* второй, т. е. может считаться функцией состояния (реальной) первой частицы в системе отсчета, начало которой совпадает со второй частицей.

**14.3. Волновая функция системы невзаимодействующих частиц.** Если частицы в системе не взаимодействуют, то оператор Гамильтона для системы имеет вид

$$\widehat{H}=\sum_{i=1}^{N}\widehat{H}_i,$$

где

$$\widehat{H}_i=-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i+U_i(x_i). \tag{14.13}$$

Операторы $\widehat{H}_i$ можно назвать одночастичными операторами Гамильтона.

Внешние поля предполагаются стационарными, поэтому энергия системы сохраняется. Ее волновая функция равна произведению координатного и временного множителей:

$$\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Для нахождения функции $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ требуется решить уравнение Шредингера без времени:

$$\widehat{H}\psi=E\psi,$$

или

$$\sum_{i=1}^{N}\widehat{H}_i\psi=E\psi. \tag{14.14}$$

Одночастичные гамильтонианы $\widehat{H}_i$ действуют только на координаты одной $i$-й частицы. Поэтому переменные в уравнении (14.14) разделяются. Выполним подстановку:

$$\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)=\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2), \ldots, \psi_N(x_N).$$

Получим

$$\sum_{i=1}^{N}\psi_1\psi_2, \ldots, \psi_{i-1}\psi_{i+1}, \ldots, \psi_N\widehat{H}_i\psi_i=E\psi_1\psi_2, \ldots, \psi_N.$$

Последнее соотношение разделим на $\psi_1\psi_2, \ldots, \psi_N$. Тогда приходим к равенству

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\psi_i}\widehat{H}_i\psi_i=E.$$

Представим энергию системы $E$ в виде слагаемых, имеющих смысл энергии отдельных частиц. Значения последних находятся из уравнений

$$\widehat{H}_i\psi_i=E_i\psi_i, \tag{14.15}$$

на которые распадается уравнение (14.14).

Решив уравнение (14.15), мы найдем уровни энергии и волновые функции для каждой частицы. Каждый уровень и каждая функция определяются некоторым набором квантовых чисел, обозначаемых далее через $n_i$ (например, для электрона в кулоновском поле набор представлен совокупностью четырех чисел: $n$, $l$, $m$, $m_s$ (см. § 13, п. 2)). Индекс $i$ дает номер частицы, к которой относится набор.

Итак, для системы

$$\begin{aligned} E_{n_1 n_2, \ldots, n_N}&=E_{n_1}+E_{n_2}+\ldots+E_{n_N},\\ \psi_{n_1 n_2, \ldots, n_N}&=\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2), \ldots, \psi_{n_N}(x_N). \end{aligned} \tag{14.16}$$

Вывод об энергии системы как сумме энергий невзаимодействующих частиц тривиален, однако вид функции состояния (14.16) весьма существен: *функция состояния системы невзаимодействующих частиц находится как произведение одночастичных функций.*

Во многих случаях функции состояния систем взаимодействующих частиц удается представить разложением по функциям типа (14.16), т. е. представить через произведения одночастичных. (Это делают с учетом временны́х множителей.) Отсюда сразу следует важный вывод: четность состояния системы равна произведению четностей состояний отдельных частиц:

$$p = p_1 p_2, \ldots, p_N.$$

Если частицы в системе одинаковы, например это электроны, то все уравнения (14.15) имеют один и тот же вид. Это означает, что спектр функций состояния и уровней энергии один и тот же для всех частиц. Квантовые состояния системы можно получить, составляя различные комбинации по $N$-одночастичных состояний. Все эти состояния определяются выборками по $N$ из бесконечного числа наборов квантовых чисел $n$, определяющих состояние одного электрона в некотором поле.

Пример 14.1. **Энергия квантового ротатора.**

Ротатором называется система из двух жестко связанных между собой материальных точек, вращающихся вокруг общего центра масс. Молекулы двухатомных газов могут успешно моделироваться ротатором, если условия позволяют пренебречь колебаниями атомов относительно друг друга. (Так обычно бывает при комнатных или более низких температурах.)

В классической механике задача о вращении ротатора сводится к изучению движения изображающей точки с приведенной массой $\mu$ по поверхности сферы радиусом $a$, где $a$ — расстояние между частицами. Кинетическая энергия точки в таком случае выражается через приведенную массу (см. ч. I, пример 15.4):

$$T = \frac{\mu v^2}{2}.$$

Чтобы перейти к операторному выражению квантовой механики, представим $T$ через момент импульса и момент инерции:

$$T = \frac{\mu^2 v^2 a^2}{2\mu a^2} = \frac{L^2}{2I}.$$

Запишем по принципу соответствия оператор Гамильтона для кваитового ротатора в системе координат, связанной с центром масс:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}.$$

Стационарное уравиение Шреднигера для ротатора имеет вид

$$\frac{\hat{L}^2}{2I}\psi(\Theta\varphi) = E\psi(\Theta\varphi).$$

Таким образом, задача сводится к отысканию собственных значений и собственных функций оператора $\hat{L}^2$. Но они нам известны (см. § 10), и это позволяет сразу записать волиовые фуикции и уровни энергии ротатора. Для последиих имеем

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}. \qquad (14.17)$$

Этот результат отиосится и к твердому телу — шаровому волчку — с момеитом иперции $I$; формула (14.17) широко используется в атомной и ядериой физике.

Уровии эиергии $2l+1$ кратио вырождеиы по магиитному кваитовому числу $m$, определяющему проекцию момеита импульса. Физически такой результат означает, что при свободиом вращеиии тела энергия ие зависит от ориеитации момеита импульса.

Пример 14.2. **Система двух частиц в потеициальиой яме.**

Рассмотрим систему двух иевзаимодействующих частиц, иаходящихся в одномериой прямоугольиой потеициальиой яме с бескоиечио высокими стеиками. Для одиой частицы эта задача была решеиа в § 5. Согласио полученииым результатам с учетом § 14, п. 3 состояиие системы определяется двумя кваитовыми числами: $n_1$ и $n_2$ ($n_i=1, 2, 3, \ldots$). Система в состояиии $(n_1, n_2)$ описывается волиовой функцией

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2)=\frac{2}{a}\sin k_1 x \sin k_2 x, \qquad (14.18)$$

где

$$k_i=\frac{\pi n_i}{a},\ i=1, 2.$$

Ее энергия

$$E_{n_1 n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2).$$

**14.4. Тождественность частиц одного и того же вида и принцип Паули.** В системе микрочастиц проявляются физические закономерности, которые не могут быть установлены при анализе движения одной частицы. Это заставляет расширить число исходных принципов квантовой теории.

Квантовая система, состоящая из одинаковых частиц, например электронов, протонов, фотонов и т. д., обладает некоторыми новыми свойствами, не имеющими аналога в классической физике. Они связаны с абсолютной тождественностью частиц одного и того же вида или сорта. В макромире в принципе всегда можно различить два тела по их массе, заряду, энергии и др. Все эти величины в классической физике считаются изменяющимися непрерывно, так что вопрос о различии параметров частиц сводится к степени точности измерений. Более того, при совпадении всех характеристик частиц одного и того же вида всегда можно отличить частицы друг от друга, постоянно следя за движением каждой частицы по своей траектории.

В микромире имеют место дискретные значения величин, характеризующих микрочастицы. Так называемые внутренние параметры совершенно одинаковы для двух частиц одного вида. Так, у всех электронов одна и та же масса, заряд, спин. Если частицы находятся в одинаковых состояниях, то совпадают и параметры состояния: у них одинаковые энергия в связанном состоянии, момент импульса и его проекция, проекция спина. *Абсолютное совпадение характеристик микрочастиц одного вида приводит к их тождественности, принципиальной неразличимости.* Это положение носит название *принципа тождественности* частиц и является постулатом квантовой механики (системы частиц).

Принцип тождественности связан и с тем, что при тесном сближении невозможно проследить за каждой частицей в отдельности вследствие неопределенности положения частиц в пространстве. Обратимся к рисунку 14.1. В случае столкновения классических тел всегда можно установить, какое из них отскочило вверх или вниз. Для квантовых объектов вместо траектории приходится рас-

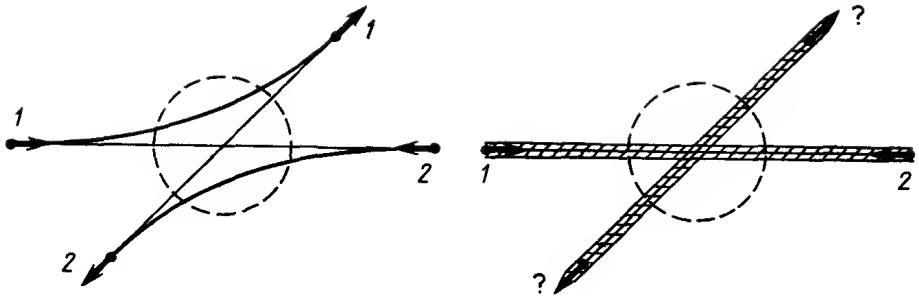



Рис 14.1

сматривать «трубку», в которой движется волновой пакет. Если нет перекрывания волновых пакетов, то частицы можно различить по их положению в пространстве. Однако при взаимодействии или даже при сближении без взаимодействия трубки пересекаются, и нельзя установить, где какая частица находится. Поэтому после соударения можно сказать только, что одна из частиц полетела вверх, а другая — вниз. В микроскопической системе, например в атоме, волновые функции отдельных электронов перекрываются, т. е. отличны от нуля в одних и тех же точках пространства. Поэтому при одинаковых характеристиках частицы совершенно неотличимы друг от друга.

Принцип тождественности приводит к важнейшему выводу: *в силу абсолютной неразличимости частиц одного и того же вида перестановка местами любых двух частиц в системе не приводит к изменению физического состояния системы.*

Посмотрим, какие ограничения накладывает принцип тождественности на операторы физических величин и функции состояния системы. Для этого учтем, что перестановка частиц в системе отображается в операторах и функциях состояния *перестановкой соответствующих координат.* Так, перестановка $j$-й и $k$-й частиц означает перестановку $x_j$ с $x_k$.

Операторы физических величин должны быть симметричными относительно индексов частиц одного сорта, т. е. они не должны зависеть от нумерации этих частиц в системе. Этому правилу удовлетворяют все операторы, введенные ранее для системы.

Волновая функция системы при перестановке аргументов, относящихся к двум разным частицам, может изменяться только на физически несущественный фазовый множитель $e^{i\alpha}$. Поэтому для функции состояния системы должно выполняться равенство

$$\psi(..., x_j, ..., x_k, ...) = e^{i\alpha}\psi(..., x_k, ..., x_j, ...).$$

Сделаем вторую перестановку координат двух рассматриваемых частиц в правой части этого равенства:

$$\psi(..., x_j, ..., x_k, ...) = e^{2i\alpha}\psi(..., x_j, ..., x_k, ...).$$

Отсюда

$$e^{2i\alpha} = 1,\ e^{i\alpha} = \pm\sqrt{1} = \pm 1.$$

Следовательно, *при перестановке координат любых двух частиц волновая функция либо только меняет знак, либо не изменяется вовсе.* Функции первого типа называются *антисимметричными*, а второго — *симметричными* (слова «по отношению к перестановке частиц местами» обычно опускаются).

Симметрия или антисимметрия волновых функций системы микрочастиц — новое важное их свойство.

Симметрия функции состояния системы сохраняется во времени, т. е. при любых взаимодействиях система не переходит из симметричного в антисимметричное состояние. Это можно установить, если ввести оператор перестановки частиц:

$$\widehat{P}_{kj}\,\psi\,(x_k, x_j)=\psi\,(x_j, x_k).$$

Его собственные значения определяются уравнениями

$$\widehat{P}_{kj}\,\psi_{\mathrm{C}}=\psi_{\mathrm{C}},\ \psi_{\mathrm{C}}\,(x_kx_j)=\psi_{\mathrm{C}}\,(x_jx_k),$$
$$\widehat{P}_{kj}\psi_{\mathrm{A}}=-\psi_{\mathrm{A}},\ \psi_{\mathrm{A}}\,(x_kx_j)=-\psi_{\mathrm{A}}\,(x_jx_k),$$

т. е. собственное значение для симметричной функции $\psi_{\mathrm{C}}$ равно $+1$, а для антисимметричной $\psi_{\mathrm{A}}$ равно $-1$.

Так как оператор Гамильтона не изменяется при перестановке координат двух одинаковых частиц, он коммутирует с оператором перестановки:

$$\widehat{P}_{kj}\widehat{H}=\widehat{H}\widehat{P}_{kj}.$$

Отсюда следует сохранение собственного значения оператора перестановки $+1$ или $-1$ во времени, т. е. сохранение класса симметрии функции.

Симметрия функций состояния не зависит от взаимодействия и движения частиц в системе.

Свойства симметрии функций состояния оказались связанными с величиной спина. В. Паули в 1924—1925 гг. установил, что *частицы с полуцелым спином (они позднее были названы фермионами) описываются антисимметричными волновыми функциями, а частицы с целым или нулевым спином (бозоны) — симметричными функциями.* Это положение носит название *принципа Паули*, оно также входит в число аксиом квантовой механики.

**14.5. Волновые функции для систем, состоящих из одинаковых бозонов и фермионов. Запрет Паули.** При обсуждении свойств симметрии функций состояния нами не обсуждалось одно обстоятельство: частицы можно различать по ориентации спина. Поэтому принцип Паули следует формулировать так, чтобы он учитывал и спиновое состояние частиц. Для функции состояния системы частиц должно выполняться равенство

$$\psi\,(..., x_j, m_{sj}, ..., x_k, m_{sk}, ...)=\pm\psi\,(..., x_k, m_{sk}, ..., x_j, m_{sj}, ...).$$

Таким образом, вид симметрии волновой функции определяется ее поведением при перестановке как пространственных, так и спиновых переменных. Последнее утверждение становится очевидным, если учесть, что при перестановке частиц местами происходит и перестановка их спинов.

Допустим, что волновую функцию системы можно представить в виде произведения координатного и спинового множителей:

$$\varphi\,(x_1, x_2, ..., x_N)\ u\,(m_{s1}, m_{s2}, ..., m_{s_N}).$$

Если данные частицы являются бозонами, то как координатный, так и спиновой множители должны иметь одинаковую симметрию, т. е. волновая функция такой бозонной системы имеет структуру $\varphi_A u_A$ или $\varphi_C u_C$ (индексы С и А означают симметричные или антисимметричные функции). Только в этих двух случаях она будет симметричной в отношении перестановки частиц.

Волновая функция фермионной системы антисимметрична относительно перестановки двух любых частиц, и поэтому она должна иметь структуру $\varphi_A u_C$ или $\varphi_C u_A$.

Вид координатной и спиновой частей волновой функции легко находится для системы невзаимодействующих частиц. В общем случае введенные ранее функции (14.16), записанные как произведения одночастичных функций состояния, определенной симметрией не обладают, поэтому непригодны для описания состояний системы одинаковых частиц. Однако можно взять их линейные комбинации, состоящие из слагаемых, отличающихся перестановкой частиц, сделав их симметричными или антисимметричными. Так, для системы двух частиц из $\varphi_{n_1}(x)$ и $\varphi_{n_2}(x)$ — одночастичных функций — образуем произведения, а из них получаем нужные функции состояния:

$$\left.\begin{aligned}\psi_C &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(\varphi_{n_1}(x_1)\,\varphi_{n_2}(x_2)+\varphi_{n_1}(x_2)\,\varphi_{n_2}(x_1)],\\ \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n_1}(x_1)\,\varphi_{n_2}(x_2)-\varphi_{n_1}(x_2)\,\varphi_{n_2}(x_1)].\end{aligned}\right\} \qquad (14.19)$$

Пример 14.3. **Составление симметричной и антисимметричной функций.** Применим найденные выражения к двум частицам, находящимся в потенциальной яме. Используя формулы (14.18), имеем

$$\psi_C = \frac{\sqrt{2}}{a}(\sin k_1x_1 \sin k_2x_2 + \sin k_1x_2 \sin k_2x_1),$$

$$\psi_A = \frac{\sqrt{2}}{a}(\sin k_1x_1 \sin k_2x_2 - \sin k_1x_2 \sin k_2x_1).$$

Заметим, что вследствие тождественности частиц уровни энергии оказываются двукратно вырожденными, так как в зависимости от выбора знака в квадратных скобках имеются две разные функции при одних и тех же значениях: $n_1$ и $n_2$.

Если система состоит из двух электронов, то можно предложить следующие конструкции спиновой части волновой функции $u(m_{s_1}, m_{s_2})$:

$$\left.\begin{aligned}
&\uparrow\uparrow\ u_C\left(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right) = u_1\left(\tfrac{1}{2}\right) u_2\left(\tfrac{1}{2}\right),\\
&\uparrow\uparrow\ u_C\left(-\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) = u_1\left(-\tfrac{1}{2}\right) u_2\left(-\tfrac{1}{2}\right),\\
&\uparrow\uparrow\ u_C\left(\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_1\left(\tfrac{1}{2}\right) u_2\left(-\tfrac{1}{2}\right) + u_1\left(-\tfrac{1}{2}\right) u_2\left(\tfrac{1}{2}\right)\right],\\
&\uparrow\downarrow\ u_A\left(\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_1\left(\tfrac{1}{2}\right) u_2\left(-\tfrac{1}{2}\right) - u_1\left(-\tfrac{1}{2}\right) u_2\left(\tfrac{1}{2}\right)\right].
\end{aligned}\right\} \qquad (14.20)$$

Если использовать не совсем строгое, но наглядное толкование, то можно сказать, что симметричный спиновый множитель $u_C(m_{s_1}m_{s_2})$ соответствует одинаковой ориентации спинов электронов ($\uparrow\uparrow$), а антисимметричный относится к случаю, когда направления спинов противоположны ($\uparrow\downarrow$). Точный смысл функций (14.20) выяснится в следующем параграфе. Коэффициент $\frac{1}{\sqrt{2}}$ нормирует функции системы (14.19) и (14.20) на единицу (при нормированных одночастичных функциях).

Обобщим теперь прием симметризации, примененный для системы двух частиц, на систему $N$ частиц. Рассмотрим снова систему невзаимодействующих частиц. Пусть символ $\psi_{n_i}(x_i)$ обозначает волновую функцию одной частицы с учетом ее спина. Индекс $n_i$ характеризует квантовое состояние. Запишем симметричную волновую функцию системы из $N$ частиц:

$$\psi_C=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum \psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2),\ \ldots,\ \psi_{n_N}(x_N).$$

Сумма берется по всевозможным перестановкам переменных $x_1$, $x_2$, ..., $x_N$ и содержит $N!$ слагаемых. Антисимметричная функция имеет вид

$$\psi_A=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2),\ \ldots,\ \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2),\ \ldots,\ \psi_{n_2}(x_N) \\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2),\ \ldots,\ \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} \qquad (14.21)$$

Перестановке частиц соответствует перестановка двух столбцов определителя (14.21).

Известно, что определитель равен нулю при совпадении любых двух строк. Это будет иметь место в формуле (14.21) при равенстве какой-нибудь пары квантовых чисел $n_j$ и $n_k$. Волновая функция фермионной системы обращается в нуль, если состояния двух частиц совпадают. Следовательно, такие случаи в системе фермионов никогда не осуществляются.

Этот вывод справедлив независимо от того, разделены в $\psi$-функции координаты и спиновые переменные или нет. Рассмотрим отдельно случай, когда функция состояния системы может быть построена в виде произведения координатного и спинового множителей. Обратимся к системе из двух электронов и допустим, что взаимодействия между частицами нет. Если спины электронов ориентированы одинаково, то спиновый множитель полной волновой функции системы симметричен, а координатная часть антисимметрична и может быть представлена выражением (14.19). Если при этом $n_1=n_2$, то $\psi_A=0$. Наборы квантовых чисел $n_1$ и $n_2$ (не включающие спиновое) могут совпадать, если спины электронов ориентированы противоположно друг другу. Но тогда квантовые состояния обеих частиц являются различными.

Допустим, что имеется $N$ невзаимодействующих частиц с полуцелым спином. Пусть, например, все $m_{s_i}=\frac{1}{2}$. Тогда

$$u_C=u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right),\ \ldots,\ u_N\left(\frac{1}{2}\right).$$

Это означает, что спины всех электронов направлены вверх. Координатная часть волновой функции в таком случае антисимметрична. Ее можно взять в виде определителя (14.21), где сейчас $\psi_A(x_i)$ — функция только от координат частиц. Волновая функция системы будет отлична от нуля только тогда, когда среди квантовых чисел $n_i$ нет одинаковых.

Итак, существует правило, которое можно называть *запретом Паули: в системе, состоящей из одинаковых фермионов, не может быть двух и более частиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии.* (Иногда полезно ориентацию спина рассматривать отдельно, т. е. добавлять в текст слева «и имеющих одну и ту же ориентацию спина».)

Запрет Паули справедлив и для систем взаимодействующих частиц, если взаимодействие не исключает возможности введения квантовых состояний отдельных частиц.

Как было показано ранее, запрет Паули вытекает из утверждения, что волновая функция системы фермионов непременно антисимметрична по отношению к перестановке местами координат и спиновых переменных каких-либо двух частиц. Поэтому такого запрета не существует для бозонов. Число бозонов в любом квантовом состоянии не ограничено.

**14.6. Обменное взаимодействие.** Необходимость описания системы частиц функциями состояния определенной симметрии, запрет Паули и другие следствия тождественности частиц означают наличие между одинаковыми частицами своеобразного взаимодействия, которое непосредственно не учтено каким-либо силовым полем и поэтому не включается в гамильтониан системы. Это взаимодействие не имеет классического аналога. Оно называется обменным и выражается в корреляции между спинами и движением частиц. Обменное взаимодействие зависит от ориентации спинов.

Обменное взаимодействие проявляется прежде всего в том, что две частицы не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии. Но этим взаимодействием можно пренебречь, если области пространственной локализации микрочастиц не перекрываются. Так, не нужно учитывать тождественность электронов в различных молекулах какого-либо газа, но нужно учитывать тождественность самих молекул при изучении газа, так как они могут «встретиться в одной точке». Точно так же совершенно необходим учет тождественности электронов в объеме всего кристалла, где электроны движутся, или протонов в ядре атома. Конкретные критерии на этот счет зависят от характера задачи, строения системы, наличия тех или иных взаимодействий и т. д.

Далее мы увидим, что обменное взаимодействие приводит к возникновению дополнительных сил, действующих на микрочастицы. Сам термин «обменное взаимодействие» связан с видом функций (14.19). При учете тождественности частиц теряет смысл утверждение, что в системе первая частица находится в состоянии $n_1$, а вторая — в состоянии $n_2$. Можно лишь утверждать, что *одна* из частиц находится в состоянии $n_1$, а *другая* — в состоянии $n_2$ без конкретизации, к какой частице какое состояние относится.

Так как при использовании указанных соотношений отдельным частицам уже нельзя сопоставлять конкретные квантовые состояния, то предполагается, что происходит непрерывный обмен состояниями. Первая частица переходит из состояния $n_1$ в состояние $n_2$, а вторая совершает обратный переход. Далее они снова меняются состояниями, и так на протяжении всего взаимодействия. (Обмен состояниями не следует понимать буквально и представлять как процесс, происходящий в пространстве и времени. Это, скорее, условный образ, чем наблюдаемое перемещение.) Подробнее об обменных силах говорится ниже, в § 17, 19.

Пример 14.4. **Зависимость плотности вероятности от ориентации спинов.** Система двух одинаковых частиц со спином 1/2, находящихся в потенциальной яме, описывается в зависимости от ориентации спина двумя различными координатными функциями (см. пример 14.3):

$$\psi_{\downarrow\uparrow}=\frac{\sqrt{2}}{a}(\sin k_1x_1 \sin k_2x_2+\sin k_1x_2 \sin k_2x_1),$$

$$\psi_{\uparrow\uparrow}=\frac{\sqrt{2}}{a}(\sin k_1x_1 \sin k_2x_2-\sin k_1x_2 \sin k_2x_1).$$

Найдем плотность вероятности попадания обеих частиц в одни и те же точки пространства ($x_1=x_2$):

$$w_{\downarrow\uparrow}=\frac{8}{a^2}\sin^2 k_1x \sin^2 k_2 x,$$

$$w_{\uparrow\uparrow}=0.$$

Различные плотности распределения частиц отвечают и различному взаимодействию их в случае, если частицы заряжены.

Таким образом, ориентация спинов вызывает существенное влияние на выбор функции состояния, а через нее — на энергию взаимодействия частиц в системе.

## § 15. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА ДЛЯ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ. ПРАВИЛО СЛОЖЕНИЯ МОМЕНТОВ

**15.1. Свойства оператора момента импульса системы.** В приложениях квантовой механики к атомам и молекулам особое значение приобретает оператор момента импульса. Анализ его свойств выливается в целое учение о моменте импульса системы и ее частей. В данном параграфе будут кратко изложены только те положения, без которых невозможно понять изучаемые ниже закономерности строения многоэлектронных атомов.

Запишем оператор полного механического момента системы в виде суммы:

$$\hat{J}=\sum_{n=1}^{N}\hat{L}_n. \qquad (15.1)$$

Символами $\widehat{\vec{L}}_n$ здесь обозначены как орбитальные, так и спиновые моменты импульса отдельных частиц. Нашей ближайшей задачей является определение коммутационных свойств операторов $\widehat{J}_x$, $\widehat{J}_y$ и $\widehat{J}_z$. Правила коммутации для проекций представляют собой наиболее важную, характерную черту момента импульса в квантовой механике. Существенно, что и для орбитальных, и для спиновых моментов они одинаковы. Поэтому можно не выделять два вида слагаемых в (15.1).

Все операторы, относящиеся к разным частицам, коммутируют друг с другом, так как они действуют на различные переменные. Отсюда

$$[\widehat{\vec{L}}_i,\ \widehat{\vec{L}}_k]=0,\ [\widehat{L}_{xi},\ \widehat{L}_{xk}]=0,\ \ldots \qquad (15.2)$$

Используя коммутационные соотношения (10.2), (13.1) и (15.2), можно показать, что

$$[\widehat{J}_x, \widehat{J}_y]=i\hbar\widehat{J}_z,\ [\widehat{J}_y, \widehat{J}_z]=i\hbar\widehat{J}_x,\ [\widehat{J}_z, \widehat{J}_x]=i\hbar\widehat{J}_y.$$

Таким образом, перестановочные соотношения для операторов проекций момента импульса системы те же, что и для моментов отдельных частиц. Отсюда следует совпадение и других свойств операторов.

Во-первых, операторы $\widehat{J}^2$ и $\widehat{J}_z$ коммутируют. Это означает, что существуют состояния с определенной величиной момента $J$ и его проекции $J_z$. Во-вторых, по аналогии с (10.7), (10.12) устанавливаем правило квантования полного механического момента системы и его проекции:

$$J=\hbar\sqrt{j(j+1)},$$
$$J_z=\hbar m_j,\ m_j=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots,\ \pm j.$$

Если операторы $\widehat{J}^2$ и $\widehat{J}_z$ коммутируют с гамильтонианом, то возможны стационарные состояния системы с сохраняющимися значениями полной энергии, момента и его проекции. В частности, это справедливо для изолированной системы. Что же касается величин $L_k^2$, $L_{zk}$ и т. д., относящихся к отдельным частицам (или частям системы), то они, вообще говоря, не имеют определенных значений (за исключением, модулей спинов частиц) и не являются интегралами движения.

Если взаимодействия внутри системы, зависящие от моментов частиц, достаточно слабы или отсутствуют совсем, то в некотором приближении или точно наряду с постоянством суммарного момента сохраняются моменты подсистем. Понятно, что допустимые значения полного момента как-то зависят от величины моментов частей системы. Этот важный вопрос нуждается в подробном анализе.

Заметим, что в классической физике подобной проблемы нет. Задача там решается сложением соответствующих векторов по правилам векторной алгебры. В квантовой теории физическим величинам сопоставлены операторы. Поэтому при введении новой

величины — момента импульса системы — заново рассматривается вопрос о спектре ее наблюдаемых значений.

**15.2. Два способа описания системы, состоящей из двух невзаимодействующих частей.** Пусть система состоит из двух невзаимодействующих частей, находящихся в состояниях с заданными значениями момента импульса $L_1$ и $L_2$. Первая подсистема описывается волновой функцией $\varphi_{l_1 m_1}$, являющейся собственной функцией операторов $\hat{L}_1^2$ и $\hat{L}_{z_1}$ и принадлежащей их собственным значениям: $\hbar\sqrt{l_1(l_1+1)}$ и $\hbar m_1$. Аналогично для описания второй подсистемы введем функцию $\varphi_{l_2 m_2}(x_2)$, являющуюся собственной функцией операторов $\hat{L}_2^2$ и $\hat{L}_{z_2}$ и принадлежащую их собственным значениям: $\hbar\sqrt{l_2(l_2+1)}$ и $\hbar m_2$.

Любые два оператора, относящиеся к разным подсистемам, коммутируют друг с другом. Поэтому все четыре оператора: $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$, $\hat{L}_{z_1}$ и $\hat{L}_{z_2}$ — попарно коммутируют. Функции

$$\psi_{l_1 l_2 m_1 m_2}(x_1 x_2) = \varphi_{l_1 m_1}(x_1)\,\varphi_{l_2 m_2}(x_2) \tag{15.3}$$

являются их общими собственными функциями. Они описывают такое состояние системы, в котором каждая из ее частей имеет определенное значение момента импульса и его проекции. Состояние системы полностью определяется четверкой квантовых чисел: $l_1$, $l_2$, $m_1$ и $m_2$.

При заданном квантовом числе $l_1$ может быть $2l_1+1$ состояний с различными значениями квантового числа $m_1$. Точно так же при фиксированной величине $l_2$ может быть $2l_2+1$ состояний, различающихся проекцией момента, т. е. квантовым числом $m_2$. Поэтому при заданных моментах $L_1$ и $L_2$ имеется $(2l_1+1)(2l_2+1)$ различных квантовых состояний всей системы. Они отличаются друг от друга квантовыми числами $m_1$ и $m_2$.

Для оператора суммарного момента импульса:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}}_1 + \hat{\vec{L}}_2$$

операторы проекций имеют вид

$$\hat{J}_x = \hat{L}_{x_1} + \hat{L}_{x_2},\quad \hat{J}_y = \hat{L}_{y_1} + \hat{L}_{y_2},\quad \hat{J}_z = \hat{L}_{z_1} + \hat{L}_{z_2},$$

а оператор квадрата полного момента импульса —

$$\hat{J}^2 = (\hat{\vec{L}}_1 + \hat{\vec{L}}_2)^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + 2(\hat{\vec{L}}_1\hat{\vec{L}}_2),$$

где

$$\hat{\vec{L}}_1\hat{\vec{L}}_2 = \hat{L}_{x_1}\hat{L}_{x_2} + \hat{L}_{y_1}\hat{L}_{y_2} + \hat{L}_{z_1}\hat{L}_{z_2}.$$

Непосредственная проверка расчетом коммутации операторов $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$ с операторами, относящимися к подсистемам, дает следующие результаты. Оператор $\hat{J}^2$ коммутирует с операторами $\hat{L}_1^2$ и $\hat{L}_2^2$, но не коммутирует с операторами $\hat{L}_{z_1}$ и $\hat{L}_{z_2}$:

$$\begin{aligned} &[\hat{J}^2, \hat{L}_1^2] = 0,\ [\hat{J}^2, \hat{L}_2^2] = 0,\\ &[\hat{J}^2, \hat{L}_{z_1}] \neq 0,\ [\hat{J}^2, \hat{L}_{z_2}] \neq 0. \end{aligned} \tag{15.4}$$

Оператор $\hat{J}_z$ коммутирует как с операторами $\hat{L}_1^2$ и $\hat{L}_2^2$, так и с операторами $\hat{L}_{z_1}$ и $\hat{L}_{z_2}$:

$$[\hat{J}_z, \hat{L}_1^2] = 0,\ [\hat{J}_z, \hat{L}_2^2] = 0,\ [\hat{J}_z, \hat{L}_{z_1}] = 0,\ [\hat{J}_z, \hat{L}_{z_2}] = 0. \tag{15.5}$$

Отсюда видно, что не существует состояний системы, в которых одновременно имели бы определенные значения все шесть величин: $J$, $J_z$, $L_1$, $L_2$, $L_{z_1}$, $L_{z_2}$, но *имеются состояния с определенными значениями пяти величин:* $L_1$, $L_2$, $L_{z_1}$, $L_{z_2}$, $J_z$ *и состояния с определенными значениями четырех величин:* $J$, $J_z$, $L_1$, $L_2$.

Состояния первого типа описываются волновыми функциями (15.3). Уже говорилось, что эти функции являются собственными функциями операторов $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$, $\hat{L}_{z_1}$ и $\hat{L}_{z_2}$. Но они также и собственные функции оператора $\hat{J}_z$:

$$\hat{J}_z\psi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = (\hat{L}_{z_1} + \hat{L}_{z_2})\,\varphi_{l_1 m_1}(x_1)\,\varphi_{l_2 m_2}(x_2) = \hbar(m_1+m_2)\,\psi_{l_1 l_2 m_1 m_2}.$$

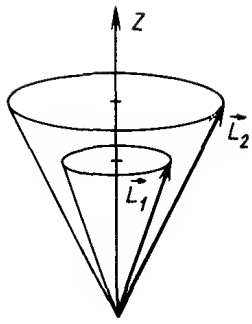



Рис 15.1

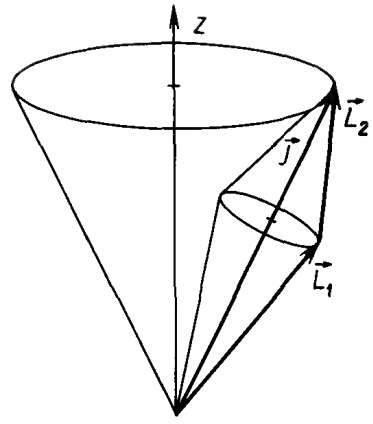



Рис 15 2.

Таким образом, оказалось, что фуикция (15.3) соответствует собственному зиачению: $J_z=\hbar m_j$, причем $m_j=m_1+m_2$.

Состояиня второго типа характеризуются кваитовыми числами $l_1$, $l_2$, $j$, $m_j$. Обозиачим соответствующие им волиовые фуикции через $\psi_{l_1 l_2 j m_j}(x_1, x_2)$. Оии являются собствеииыми для операторов $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$.

Две группы коммутирующих операторов: $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$, $\hat{L}_{z_1}$, $\hat{L}_{z_2}$, $\hat{J}_z$ и $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ — пересекаются; три оператора: $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$ и $\hat{J}_z$ — входят как в ту, так и в другую группу. Поэтому чнсло общих собствеииых фуикций для двух указаииых иаборов операторов должио быть одио и то же. Отсюда следует, что при одиих и тех же зиачеииях $l_1$ и $l_2$ число кваитовых состояиий второго типа равио числу кваитовых состояний первого типа, т. е. $(2l_1+1)(2l_2+1)$.

Два разобраииых способа описаиия системы иаходят иаглядное отображеиие с помощью так называемой векториой модели. Первому из них соответствует иезависимая прецессия векторов $\vec{L}_1$ и $\vec{L}_2$ вокруг оси $Oz$, изображеииая на рисунке 15.1. В этом случае величииы $L_1$, $L_2$, $L_{z_1}$, $L_{z_2}$ и $J_z$ являются иитегралами движеиия. Кроме того, $J_z=L_{z_1}+L_{z_2}$.

При втором способе предполагается, что вокруг оси $Oz$ прецессирует вектор $\vec{J}$ (рис. 15.2). При этом сохраияются величина момеита $J$ и его проекция иа ось. Вектор $\vec{J}$ получается путем сложеиия векторов $\vec{L}_1$ и $\vec{L}_2$ по правнлу параллелограмма. Слагаемые векторы постояины по модулю и располагаются под постояиным углом друг к другу (и к вектору $\vec{J}$). Оии также прецессируют вокруг иаправлеиия вектора суммариого момеита.

**15.3. Задача о сложении моментов импульса.** Оператор полного механического момента, или момента импульса, системы определен ранее формулой (15.1), которая аналогична классической формуле

$$\vec{J}=\sum_{k=1}^{N}\vec{L}_k.$$

Для замкнутой макроскопической системы материальных точек суммарный момент $\vec{J}$ сохраняется во времени, а векторы $\vec{L}_k$ — величины переменные. Поэтому для вычисления $\vec{J}$ следует знать мгновенные значения $\vec{L}_k$ в один и тот же момент времени. Измерение $\vec{J}$ упрощается, если его можно произвести до начала взаимодействия в системе; искомая величина $\vec{J}$ остается неизменной далее при любом внутреннем взаимодействии.

Закон сохранения момента импульса замкнутой системы справедлив и для микрочастиц; поэтому полный момент можно находить по измеренным моментам ее невзаимодействующих частей, а результат использовать и после «включения» взаимодействия. Однако суммирование векторов $\hat{\vec{L}}_k$ в квантовой механике осложняется новыми свойствами, приобретаемыми моментом импульса в микромире. Определенные значения имеют модуль и одна проекция, они квантуются; определенные значения указанных величин для суммы и слагаемых имеются не во всех квантовых состояниях системы.

Задача на сложение моментов импульса в квантовой механике такова: *заданы модули моментов частиц системы; требуется определить допустимые значения модуля и проекций полного момента.* Так, в теории многоэлектронных атомов возникает вопрос о нахождении момента импульса электронной оболочки по известным (из задачи о частице в центральном поле) моментам отдельных электронов. Аналогично ставится вопрос о суммарном спине нескольких электронов в атоме, о спине ядра, состоящего из протонов и нейтронов.

Для получения правил сложения моментов импульса рассмотрим систему, состоящую из двух частей, не взаимодействующих между собой. По условию задачи они находятся в состоянии с определенными значениями $L_1$, $L_2$.

Нас интересуют значения модуля и проекции момента импульса системы $J$, $J_z$. Следовательно, нужно рассматривать функции состояния системы, собственные как для операторов $\hat{L}_1^2$ и $\hat{L}_2^2$, так и для операторов $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$. Нетрудно показать, что операторы $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_2^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ коммутируют между собой, т. е. существуют состояния системы с определенными значениями указанных четырех величин: заданных $L_1$ и $L_2$ и искомых $J$ м $J_z$ (или заданных $l_1$ и $l_2$ и искомых $j$ и $m_j$).

Однако в таких состояниях проекции складываемых векторов $L_{1z}$ и $L_{2z}$ не имеют определенного значения, так как операторы $\hat{L}_{1z}$ и $\hat{L}_{2z}$ с оператором $\hat{J}^2$ не коммутируют. Поэтому ориентация векторов $\vec{L}_1$ и $\vec{L}_2$ неопределенна, а их сумма может принимать несколько значений.

Если мы найдем $j_{\min}$ и $j_{\max}$, то остальные значения $j$ заключены между ними и отличаются друг от друга на единицу; это следует из общих правил квантования момента импульса (см. § 15, п. 1).

Для нахождения крайних значений $j$ воспользуемся нестрогим, но наглядным методом векторных диаграмм, приводящих к верному результату. На рисунке 15.3 систему складываемых векторов $\vec{L}_1$ и $\vec{L}_2$ надо считать вращающейся вокруг сектора $\vec{J}$, а сам вектор $\vec{J}$ вращающимся вокруг оси $Oz$. Поэтому проекция $J_z$ постоянна, а $L_{1z}$ и $L_{2z}$ нет.

На рисунке 15.3, *а* показан случай наименьшего угла между векторами $\vec{L}_1$ и $\vec{L}_2$, $J$ принимает наибольшее значение; соответственно на рисунке 15.3, *б* — наименьшее. Следовательно, искомые значе-

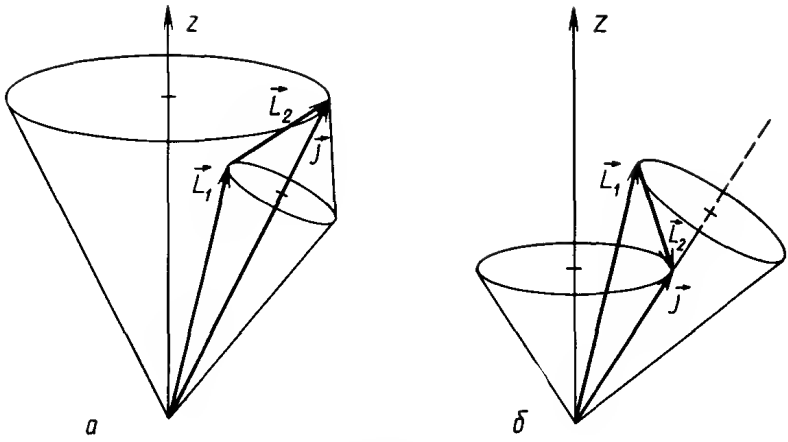



Рис 15.3

ния $J$ удовлетворяют неравенствам, справедливым для сторон треугольника:

$$L_1 - L_2 \leqslant J \leqslant L_1 + L_2. \qquad (15.6)$$

Проверим, что неравенства (15.6) выполняются, если $l_1 \geqslant l_2$ и $j_1 = l_1 - l_2$, а $j_2 = l_1 + l_2$.

Непосредственная подстановка этих значений в формулы для модулей векторов дает два верных неравенства:

$$\hbar\sqrt{l_1(l_1+1)} - \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)} < \hbar\sqrt{(l_1-l_2)(l_1-l_2+1)},$$
$$\hbar\sqrt{l_1(l_1+1)} + \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)} > \hbar\sqrt{(l_1+l_2)(l_1+l_2+1)},$$

в чем нетрудно убедиться, приводя их к очевидным.

Предложенные значения $j$ оказываются минимальным и максимальным: $j_1 = j_{\min}$, $j_2 = j_{\max}$, в чем убеждаемся, испытывая числа $j_1 - 1 = l_1 - l_2 - 1$ и $j_2 + 1 = l_1 + l_2 + 1$, которые нарушают неравенства (15.6). Правило для определения допустимых значений квантового числа $j$ найдено. Для $l_1 \geqslant l_2$ имеем

$$j = l_1 - l_2,\ l_1 - l_2 + 1,\ \ldots,\ l_1 + l_2,$$

или

$$l_1 - l_2 \leqslant j \leqslant l_1 + l_2. \qquad (15.7)$$

Если складываются только орбитальные моменты, то квантовое число $j$ целочисленно; если в число слагаемых входят спиновые моменты, то $j$ может принимать как целые, так и полуцелые значения. Но следует помнить, что в том и другом случае «шаг» для числа $j$ единичный, т. е. значения $j$ либо целые, либо полуцелые.

После того как значения квантового числа $j$ найдены, для каждого $j$ находят все возможные $m_j$:

$$m_j = -j,\ -(j-1),\ \ldots,\ (j-1),\ j.$$

Вместе с ними находятся и проекции $J_z$ по общему правилу квантования (10.12).

Результаты, полученные при анализе системы невзаимодействую-

щих частиц, справедливы для любой замкнутой системы, если квантовые числа $l_1$ и $l_2$ заданы до начала взаимодействия. Из формулы (15.7) по ним находятся сохраняющиеся при любом взаимодействии возможные значения $J$, а затем и $J_z$. (Разумеется, после начала взаимодействия определенных моментов импульса $L_1$ и $L_2$ уже не будет.)

Если некоторая система микрочастиц рассматривается по условиям задачи как целостный и точечный объект, то ее полный момент импульса есть спин. Правила сложения моментов позволят найти спины атомов и ядер в различных возможных для них квантовых состояниях через спины и орбитальные моменты входящих в них частиц. Причем сложение более чем двух моментов выполняется последовательно. Порядок сложения определяется интенсивностью взаимодействия и другими физическими соображениями.

В задаче о сложении моментов импульса отыскивают также функции состояния системы, соответствующие определенным значениям $L_1$, $L_2$, $J$, $J_z$, по заданным волновым функциям входящих в нее частиц. Однако мы не касаемся этого вопроса.

Пример 15.1. **Расчет полного момента импульса электрона в атоме водорода.** Допустим, что можно пренебречь спин-орбитальным взаимодействием, т. е. взаимодействием магнитных спиновых и орбитальных моментов.

Тогда электрон характеризуется независимыми орбитальным и спиновым моментами. Волновая функция электрона:

$$\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)\, u(m_s)$$

есть частный случай функции (15.3). Она описывает состояние с определенным орбитальным моментом $l$, его проекцией $m_l$, а также спином $s=\frac{1}{2}$ и его проекцией $m_s=\pm\frac{1}{2}$.

Из правил сложения моментов следует, что существуют состояния электрона с определенным орбитальным моментом $l$, спином $s=\frac{1}{2}$, а также полным моментом $j$ и его проекцией $m_j$. Указанный момент находится как сумма орбитального и спинового моментов, поэтому $j=l\pm\frac{1}{2}$. В $s$-состояниях орбитальный момент равен нулю. Тогда полный и спиновый моменты электрона совпадают. В этом случае квантовое число $j$ принимает только одно значение: $j=\frac{1}{2}$.

Волновые функции электрона в состояниях с заданным полным моментом обозначим так:

$$\psi_{nljm_j}(r, \theta, \varphi).$$

В общем случае выделить отдельно спиновый множитель нельзя. (Эта функция состояния представляет собой двухрядную матрицу-столбец.) Функция $\psi_{nljm_j}$ является собственной функцией операторов $\widehat{H}$, $\widehat{L}^2$, $\widehat{S}^2$, $\widehat{J}^2$, $\widehat{J}_z$. Причем $\widehat{\vec{J}}=\widehat{\vec{L}}+\widehat{\vec{S}}$ и $\widehat{J}_z=\widehat{L}_z+\widehat{S}_z$.

Пример 15.2. **Сложение спиновых моментов двух электронов.**

Спиновые функции системы из двух невзаимодействующих электронов можно записать в виде четырех произведений одночастичных функций:

$$u_1\left(\frac{1}{2}\right) u_2\left(\frac{1}{2}\right),\ m_{1s}=\frac{1}{2},\ m_{2s}=\frac{1}{2},$$

$$u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right),\ m_{1s}=-\frac{1}{2},\ m_{2s}=-\frac{1}{2},$$
$$u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right),\ m_{1s}=\frac{1}{2},\ m_{2s}=-\frac{1}{2},\qquad(15.8)$$
$$u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right),\ m_{1s}=-\frac{1}{2},\ m_{2s}=\frac{1}{2}.$$

Они соответствуют состояниям, в которых заданы не только спины частиц $\left(s_1=\frac{1}{2},\ s_2=\frac{1}{2}\right)$, но и проекции спинов обоих электронов. Кроме того, в этих состояниях имеет определенное значение проекция полного момента: $S_z=S_{1z}+S_{2z}$; мы получаем следующие ее значения: $S_z=\hbar m_s$, где $m_s=0,\ 1,\ -1$. Соответственно

$$\left.\begin{aligned}&m_s=1,\ u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right),\qquad m_s=0,\ u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right),\\&m_s=-1,\ u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right),\ m_s=0,\ u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right).\end{aligned}\right\}\qquad(15.9)$$

Квантовое число полного спина системы принимает значения от $s_1-s_2$ до $s_1+s_2$. Следовательно, $s=0$ или $s=1$. При $s=1$ возможны состояния с $m_s=0,\pm1$; при $s=0$ может быть только $m_s=0$.

Запишем спиновые функции системы двух электронов, отвечающие состояниям с заданными значениями $s$ и $m_s$ и определенному классу симметрии:

$$\left\{\begin{aligned}&m_s=1,\ u_C=u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right),\\&s=1,\ m_s=0,\ u_C=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right)+u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right)\right],\\&m_s=-1,\ u_C=u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right),\end{aligned}\right.\qquad(15.10)$$
$$s=0,\ m_s=0,\ u_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_1\left(\frac{1}{2}\right)u_2\left(-\frac{1}{2}\right)-u_1\left(-\frac{1}{2}\right)u_2\left(\frac{1}{2}\right)\right].$$

Заметим, что выражения (15.10) являются частным случаем общей формулы (14.19). Они обладают определенной симметрией относительно перестановки частиц. Данные функции мы будем использовать в качестве симметричных и антисимметричных спиновых множителей в полной волновой функции системы (см. (14.7)).

Пример 15.3. **Сложение спиновых моментов нескольких электронов.**

Возьмем сначала три частицы. Складывая спины первого и второго электронов, получаем систему со спином 0 или 1. Добавляя спин третьего электрона, получаем значения квантового числа суммарного спина всех трех частиц: $s=\frac{1}{2},\ \frac{3}{2}$.

Вообще, для нечетного числа частиц с полуцелым спином имеем

$$s=\frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\ \ldots,\ \frac{N}{2},$$

для четного —

$$s=0,\ 1,\ \ldots,\ \frac{N}{2}.$$

Пример 15.4. **Сложение орбитальных моментов двух электронов.**

Пусть $l$ — квантовое число суммарного орбитального момента:

$$l=l_1+l_2,\ l_1+l_2-1,\ \ldots,\ l_1-l_2\ (l_1\geqslant l_2).$$

Если второй электрон находится в $s$-состоянии, то $l_2=0$ и $l=l_1$. Если оба электрона — в $p$-состоянии, то $l_1=1$, $l_2=1$ и $l=0,\ 1,\ 2$ и т. д. Соответственно для каждого значения $l$ имеем ряд значений $m_l$: $m_l=0,\ \pm1,\ \ldots,\ \pm l$.

## § 16. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

**16.1. Волновые функции и уровни энергии в первом приближении теории возмущений.** Уравнение Шредингера в немногих конкретных задачах решается точно. Что касается системы микрочастиц, то только для двух частиц имеются точные решения (см. атом водорода с учетом приведенной массы). Поэтому для вычисления волновых функций и уровней энергии систем микрочастиц используются разнообразные приближенные методы. Один из таких методов развит в так называемой *теории возмущений*. Она сыграла выдающуюся роль в развитии квантовой механики и является основным способом расчета во многих теоретических и практических вопросах.

Рассмотрим основы теории возмущений для стационарных состояний дискретного спектра при отсутствии вырождения.

Нам нужно решить уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{16.1}$$

для системы с гамильтонианом $\hat{H}$, причем прямое интегрирование уравнения (16.1) невозможно, и поэтому мы не можем найти ни функции состояния $\psi$, ни уровни энергии $E$. Для применения теории возмущений должны быть известны уровни энергии и волиовые функции другой системы, близкой к исследуемой. Для нее уравнение Шредингера имеет вид

$$\hat{H}_0\varphi_n = E_n^{(0)}\varphi_n. \tag{16.2}$$

По установившейся терминологии систему с оператором Гамильтона $\hat{H}_0$ иазывают невозмущенной. Она представляет собой приближенную модель исследуемой системы, так как операторы $\hat{H}$ и $\hat{H}_0$ незначительно отличаются друг от друга.

Если различием в операторах $\hat{H}$ и $\hat{H}_0$ пренебречь, то

$$\psi_n \simeq \psi_n^{(0)} = \varphi_n, \quad E_n \simeq E_n^{(0)}.$$

Эти равенства соответствуют *нулевому приближению* теории возмущений. Оператор $w = \hat{H} - \hat{H}_0$ называется *оператором возмущения*. Учет малого возмущения $\hat{w}$ изменяет уровни энергии и волновые функции моделирующей системы в сторону приближения к уровням энергии и волновым функциям исследуемой системы. Предположим

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n, \quad \psi_n = \varphi_n + f_n. \tag{16.3}$$

Вычисление $\Delta E_n$ и $f_n$ называется расчетом возмущения, которое вносится в невозмущенную систему оператором $\hat{w}$.

Расчет в первом приближении производится так. Подставим значения $E_n$ и $\psi_n$ из соотношений (16.3) в уравнение (16.1):

$$(H_0 + \hat{w})(\varphi_n + f_n) = (E_n^{(0)} + \Delta E_n)(\varphi_n + f_n). \tag{16.4}$$

Поправки $\Delta E_n$ и $f_n$ считаем одного порядка малости с возмущением $\hat{w}$. Раскрывая скобки в формуле (16.4), оставим только линейные по этим величинам члены. Получается уравнение, из которого можно

найти приближеиные значения $\Delta E_n$ и $f_n$. Обозначим их через $\Delta E_n^{(1)}$ и $f_n^{(1)}$. Само уравнение имеет вид

$$\hat{H}_0\varphi_n+\hat{H}_0f_n^{(1)}+\hat{w}\varphi_n=E_n^{(0)}\varphi_n+E_n^{(0)}f_n^{(1)}+\Delta E_n^{(1)}\varphi_n.$$

Учитывая равенство (16.2), получаем

$$\hat{H}_0f_n^{(1)}+\hat{w}\varphi_n=E_n^{(0)}f_n^{(1)}+\Delta E_n^{(1)}\varphi_n. \tag{16.5}$$

Умножим уравнение (16.5) на $\varphi_n^*$ и проинтегрируем по всей области определения функции $\varphi_n$:

$$\int\varphi_n^*\hat{H}_0f_n^{(1)}\,dV+\int\varphi_n^*\hat{w}\,\varphi_n\,dV=E_n^{(0)}\int\varphi_n^*f_n^{(1)}\,dV+\Delta E_n^{(1)}\int\varphi_n^*\varphi_n\,dV. \tag{16.6}$$

Если функции $\varphi_n$ нормированы, то

$$\int\varphi_n^*\varphi_n\,dV=1.$$

Кроме того, используя самосопряженность оператора $\hat{H}_0$, имеем

$$\int\varphi_n^*\hat{H}_0f_n^{(1)}\,dV=\int f_n^{(1)}(\hat{H}_0\varphi_n)^*dV=E_n^{(0)}\int f_n^{(1)}\,\varphi_n^*dV.$$

Из равенства (16.6) теперь следует соотношение

$$\Delta E_n^{(1)}=\int\varphi_n^*\,\hat{w}\,\varphi_n\,dV. \tag{16.7}$$

Поправка к энергии в первом приближении теории возмущений оказалась равной среднему значению для оператора возмущения $\hat{w}$ по невозмущенному состоянию $\varphi_n$. Уровень энергии исходной системы в первом приближении

$$E_n^{(1)}=E_n^{(0)}+\Delta E_n^{(1)}. \tag{16.8}$$

Поправку к волновой функции ищем в виде суперпозиции функций состояния невозмущенной системы:

$$f_n^{(1)}=\sum_k C_k\varphi_k(x). \tag{16.9}$$

Подстановка (16.9) в (16.5) дает

$$\hat{H}_0\sum_k C_k\varphi_k+\hat{w}\varphi_n=E_n^{(0)}\sum_k C_k\varphi_k+\Delta E_n^{(1)}\varphi_n. \tag{16.10}$$

Учитывая что

$$\hat{H}_0\sum_k C_k\varphi_k=\sum_k C_kE_k^{(0)}\varphi_k,$$

запишем уравнение (16.10) в виде

$$\hat{w}\varphi_n=\Delta E_n^{(1)}\varphi_n+\sum_k(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})\,C_k\varphi_k. \tag{16.11}$$

Умножая (16.11) на $\varphi_m^*\,(m\neq n)$ и интегрируя по всему пространству, получаем

$$\int\varphi_m^*\hat{w}\varphi_n dV=\Delta E_n^{(1)}\int\varphi_m^*\,\varphi_n\,dV+\sum_k(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})\,C_k\int\varphi_m^*\,\varphi_k\,dV. \tag{16.12}$$

Функции $\varphi_k$ являются собственными функциями эрмитова оператора, поэтому они попарно ортогональны. Интеграл

$$\int\varphi_m^*\,\varphi_k\,dV$$

отличен от нуля только при $k=m$. Поэтому из равенства (16.12) следует

$$C_m=\frac{w_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\ (m\neq n), \tag{16.13}$$

где $w_{mn}$ называется матричным элементом оператора возмущения:

$$w_{mn}=\int \varphi_m^*\,\hat{w}\,\varphi_n\,dV$$

(при $m=n$ $w_{mn}=\Delta E_n^{(1)}$ — поправка к энергии в первом приближении теории возмущений).

Коэффициенты в разложении найдены. С помощью (16.3) можно записать функцию состояния в первом приближении:

$$\psi_n^{(1)}=\varphi_n+\sum_{m\neq n}\frac{w_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\varphi_m. \tag{16.14}$$

(В формуле (16.14) полагают $C_n=0$, чтобы с той же точностью выполнялось условие нормировки $\psi_n^{(1)}$.)

Задача нахождения поправок в первом приближении теории возмущений решена. Выражения (16.7) и (16.14) позволяют записать критерий применимости теории возмущений. Формулы (16.7) и (16.14) можно использовать, если

$$|w_{nn}|\ll|E_n^{(0)}|$$

и

$$|w_{nm}|\ll|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}|. \tag{16.15}$$

При выполнении неравенств (16.15) во многих случаях уже первое приближение обеспечивает достаточную точность. При необходимости процесс уточнения функций состояния и уровней энергии может быть продолжен в следующих приближениях.

Метод теории возмущений важен не только как средство для расчета физических характеристик системы. Он имеет большое значение для качественного осмысления свойств сложных систем. Как покажет дальнейшее изучение курса, на основе теории возмущений часто без непосредственных вычислений удается понять существо тех изменений в системе, которые возникают за счет возмущения, накладывающегося на основное взаимодействие. В этом плане оператор $\widehat{H}_0$ как бы создает исходное состояние, а возмущение придает ему небольшие по энергии, но часто принципиально важные изменения.

**16.2. Уровни энергии во втором приближении теории возмущений.** Для нахождения уровней энергии во втором приближении теории возмущений используем найденную в § 16 п. 1 функцию состояния первого приближения. Подставим в уравнение (16.1) выражения

$$\widehat{H}=\widehat{H}_0+\hat{w},$$

$$\psi=\varphi_n+\sum_{m\neq n}C_m\varphi_m,$$

$$E=E_n^{(0)}+w_{nn}+\Delta E_n.$$

Получим

$$(\widehat{H}_0+\hat{w})(\varphi_n+\sum_{m\neq n} C_m\varphi_m)=(E_n^{(0)}+w_{nn}+\Delta E_n^{(2)})(\varphi_n+\sum_{m\neq n} C_m\varphi_m).$$

Здесь коэффициенты $C_m$ определяются выражением (16.13).

При раскрытии скобок в уравнении сохраняем слагаемые до второго порядка малости включительно. Для этого нужно учесть, что множители $\widehat{H}_0$, $\varphi_n$ и $E_n^{(0)}$ следует считать большими, имеющими нулевой порядок малости; множители $w$, $C_m$ и $w_{nn}$ имеют первый порядок малости, а $\Delta E_n^{(2)}$ — второй. Используя (16.2), получим уравнение

$$\sum_{m\neq n} C_m E_m^{(0)}\varphi_m+\hat{w}\varphi_n+\sum_{m\neq n} C_m\hat{w}\varphi_m=E_n^{(0)}\sum_{m\neq n} C_m\varphi_m+w_{nn}\varphi_n+$$

$$+w_{nn}\sum_{m\neq n} C_m\varphi_m+\Delta E_n^{(2)}\varphi_n.$$

Умножим его на $\varphi_n^*$ и проинтегрируем по всей области изменения переменных. Если далее воспользоваться ортонормированностью функций $\varphi_m$, то приходим к равенству

$$\Delta E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n} C_m w_{mn}=\sum_{m\neq n}\frac{w_{mn}w_{nm}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}.$$

Обратим внимание на следующую деталь. Поправка второго порядка к наименьшему по энергии (основному) состоянию всегда отрицательна.

Действительно,

$$\Delta E_1^{(2)}=\sum_{m>1}\frac{|w_{m1}|^2}{E_1^{(0)}-E_m^{(0)}}<0,$$

так как $E_m^{(0)}>E_1^{(0)}$ при всех $m>1$.

Итак, во втором приближении теории возмущений уровень энергии определяется формулой

$$E_n^{(2)}=E_n^{(0)}+w_{nn}+\sum_{m\neq n}\frac{w_{mn}w_{nm}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}. \qquad (16.16)$$

**16.3. Теория возмущений при наличии вырождения.** Может оказаться, что уровни энергии невозмущенной задачи вырождены. Это означает, что одной и той же энергии $E_n^{(0)}$ соответствует несколько состояний, описываемых волновыми функциями

$$\varphi_{ns} \text{ при } s=1, 2, \ldots, \gamma.$$

Для уровней энергии в нулевом приближении можно снова принять значения энергии невозмущенной задачи: $E_n^{(0)}$. С волновыми функциями дело обстоит сложнее, так как $\psi_n^{(0)}$ можно приравнять любой из функций $\varphi_{ns}$ или даже какой-нибудь их линейной комбинации, т. е. положить

$$\psi_n^{(0)}=\sum_{s=1}^{\gamma} A_{ns}\varphi_{ns}.$$

В последующих приближениях ищутся поправки к уровням энергии и волновым функциям нулевого приближения. Очевидно, что вырождение осложняет задачу, так как помимо поправок следует найти еще и коэффициенты $A_{ns}$.

Для нахождения уровней энергии в первом приближении подставим в уравнение (16.1) выражения

$$E_{nk}=E_n^{(0)}+\Delta E_{nk},$$

$$\psi_{nk}=\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}+f_{nk},$$

$$\widehat{H}=\widehat{H}_0+w.$$

Индексы $n$ и $k$ нумеруют определенное состояние вырожденной системы, к которому ищутся поправки $\Delta E_{nk}$ и $f_{nk}$. После подстановки имеем с точностью до членов первого порядка малости:

$$\widehat{H}_0\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}+\widehat{H}_0 f_{nk}^{(1)}+w\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}=E_n^{(0)}\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}+$$

$$+E_n^{(0)}f_{nk}^{(1)}+\Delta E_{nk}^{(1)}\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}. \qquad (16.17)$$

Замечая, что

$$\widehat{H}_0\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}=E_n^{(0)}\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns},$$

упростим равенство (16.17). Оно примет вид

$$\widehat{H}_0 f_{nk}^{(1)}+w\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}=E_n^{(0)}f_{nk}^{(1)}+\Delta E_{nk}^{(1)}\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,\varphi_{ns}. \qquad (16.18)$$

В дальнейших выкладках предполагается, что функции $\varphi_{ns}$ ортонормированны, так что

$$\int\varphi_{mk}^{*}\,\varphi_{ns}\,dV=\delta_{mn}\,\delta_{ks}.$$

Умножим уравнение (16.18) на $\varphi_{nk}^{*}$ и проинтегрируем по координатам. Получим

$$\int\varphi_{nk}^{*}\widehat{H}_0 f_{nk}^{(1)}\,dV+\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}\,w_{nk,ns}=E_n^{(0)}\int\varphi_{nk}^{*}f_{nk}^{(1)}\,dV+\Delta E_{nk}^{(1)}A_{nk}. \qquad (16.19)$$

Вследствие самосопряженности оператора $\widehat{H}_0$ первое слагаемое в левой части равенства (16.19) равно первому слагаемому в правой части. После сокращения одинаковых членов приходим к выражению

$$\sum_{s=1}^{\gamma}A_{ns}w_{nk,ns}=\Delta E_{nk}^{(1)}A_{nk},$$

или

$$A_{nk}\,(w_{nk,ns}-\Delta E_{nk}^{(1)})+\sum_{\substack{s=1\\ s\neq k}}^{\gamma}A_{ns}w_{nk,ns}=0.$$

Перебирая все возможные значения $k$ в пределах от 1 до $\gamma$, получаем систему линейных однородных уравнений относительно неизвестных коэффициентов $A_{ns}$:

$$\begin{cases}A_{n1}\,(w_{n1,n1}-\Delta E_{n1}^{(1)})+A_{n2}w_{n1,n2}+\ldots+A_{n\gamma}w_{n1,n\gamma}=0,\\ A_{n1}w_{n2,n1}+A_{n2}\,(w_{n2,n2}-\Delta E_{n2}^{(1)})+\ldots+A_{n\gamma}w_{n2,n\gamma}=0,\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\ A_{n1}w_{n\gamma,n1}+A_{n2}w_{n\gamma,n2}+\ldots+A_{n\gamma}\,(w_{n\gamma,n\gamma}-\Delta E_{n\gamma}^{(1)})=0.\end{cases}$$

Такая система имеет решение, если нулю равен определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных:

$$\begin{vmatrix} w_{n1,n1}-\Delta E_{n1}^{(1)} & w_{n1,n2}, & \ldots, & w_{n1,n\gamma} \\ w_{n2,n1} & w_{n2,n2}-\Delta E_{n2}^{(1)}, & \ldots, & w_{n2,n\gamma} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ w_{n\gamma,n1} & w_{n\gamma,n2}, & \ldots, & w_{n\gamma,n\gamma}-\Delta E_{n\gamma}^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \qquad (16.20)$$

При заданных матричных элементах $w_{nm,nk}$ можно добиться равенства нулю определителя (16.20), подбирая значения поправок $\Delta E_{ns}^{(1)}$. Тем самым найдутся уровни энергии первого приближения.

С точки зрения дальнейшего использования для нас особенно важен случай, когда все недиагональные матричные элементы оператора возмущения равны нулю. Если

$$w_{nk,ns}=0 \ (k\neq s),$$

то для нахождения поправок к энергии получаем уравнение

$$\begin{vmatrix} w_{n1,n1}-\Delta E_{n1}^{(1)} & 0, & \ldots, & 0 \\ 0 & w_{n2,n2}-\Delta E_{n2}^{(1)}, & \ldots, & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0, & \ldots, & w_{n\gamma,n\gamma}-\Delta E_{n\gamma}^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

которое имеет $\gamma$ корней:

$$\Delta E_{ns}^{(1)}=w_{ns,\ ns} \ (s=1,\ 2,\ \ldots,\ \gamma).$$

Тогда уровни энергии системы в первом порядке теории возмущений определяются выражениями

$$E_{nk}^{(1)}=E_n^{(0)}+w_{nk,nk}. \qquad (16.21)$$

Если все числа $w_{nk,\ nk}$ различны, то учет возмущения полностью снимает вырождение. *Уровень энергии $E_n^{(0)}$ расщепляется на $\gamma$ подуровней.*

Формула (16.21) совпадает с (16.8), если допустим, что в (16.8) индекс $n$ нумерует состояния, а не уровни энергии невозмущенной системы. Это фактически означает, что при расчете уровней энергии можно не отличать случай, когда вырождения нет, от случая, когда оно есть, но волновые функции невозмущенной системы подобраны так, что матрица оператора возмущения $w_{ns,nk}$ является диагональной. Если последнее условие выполняется, то функции $\varphi_{ns}$ как раз и будут правильными волновыми функциями нулевого приближения.

**16.4. Тонкая структура спектра атома водорода.** Значения уровней энергии атома водорода, найденные в § 11, п. 3, следует рассматривать как приближенные, так как они получены без учета магнитных взаимодействий в атоме.

Магнитное спин-орбитальное взаимодействие представляет собой релятивистский эффект. Поэтому установить вид оператора спин-орбитального взаимодействия можно только в последовательно релятивистской теории. Здесь же мы введем его постулативно:

$$\hat{w}_{LS}=f\frac{\hat{\vec{M}}_L\hat{\vec{M}}_S}{r^3}. \qquad (16.22)$$

Выражение (16.22) совпадает по форме с классическим выражением для потенциальной энергии взаимодействия двух магнитных диполей, расположенных на расстоянии $r$ друг от друга, если $f=\frac{\mu_0}{4\pi}$ (см. ч. III, § 8).

Поправка к энергии атома за счет спин-орбитального взаимодействия равна среднему от оператора $\hat{w}_{LS}$. Усреднение производится по невозмущенному состоянию, в котором магнитные взаимодействия отсутствуют. Проведем качественный анализ поправки.

С помощью (12.6) и (13.7) оператор (16.22) может быть представлен в следующем виде:

$$\hat{w}_{LS}=C\frac{\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}}{r^3}, \tag{16.23}$$

где $C$ — постоянный коэффициент.

Операторы $\hat{\vec{L}}$ и $\hat{\vec{S}}$ действуют только на угловую и спиновую части полной волновой функции электрона. Поэтому вычисление средних значений сомножителей $\frac{1}{r^3}$ и $\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}$, входящих в соотношение (16.23), можно производить отдельно.

Значение $\overline{r^{-3}}$ зависит от квантовых чисел $n$ и $l$, определяющих радиальную часть функции состояния атома водорода.

Среднее значение оператора $\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}$, найденное с помощью функций состояния невозмущенной задачи, зависит от взаимной ориентации векторов $\hat{\vec{L}}$ и $\hat{\vec{S}}$. Поскольку спин по отношению к любому выделенному в пространстве направлению ориентируется двояко, поправка к энергии (за счет числителя) принимает два разных значения.

Состояния атома, соответствующие этим подуровням, отличаются величиной полного момента импульса электрона. Итак,

$$(w_{LS})_{nlj}=\Delta E^{(1)}(n,\ l,\ j).$$

При учете спин-орбитального взаимодействия в атоме водорода проекции спинового и орбитального моментов уже не являются сохраняющимися величинами. В числе интегралов движения наряду с энергией входят орбитальный момент, полный механический момент и его проекция $J_z$. Постоянство этих величин прямо следует из того факта, что операторы $\hat{L}^2$, $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$ коммутируют с гамильтонианом:

$$\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta-\frac{\varkappa e^2}{r}+\hat{w}_{LS}.$$

Сохранение полного момента импульса $\vec{J}$ для изолированного атома связано с изотропией пространства, т. е. оно является следствием одного из самых общих законов природы. Уровни энергии остаются вырожденными по квантовому числу $m_j$; если на атом не действуют внешние поля, то его энергия не должна зависеть от ориентации полного момента импульса системы в пространстве.

Спин-орбитальное взаимодействие невелико и не изменяет величины орбитального момента. Поэтому квантовое число $l$ остается среди характеристик квантовых состояний атома.

Подтвердим качественные соображения расчетом. Введем оператор полного момента импульса электрона: $\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}$. Из формулы

$$\hat{J}^2=\hat{L}^2+\hat{S}^2+2(\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}})$$

находим $\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}=\frac{1}{2}(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2)$. (16.24)

Тогда для $\hat{w}_{LS}$ получим выражение

$$\hat{w}_{LS}=\frac{1}{2}C\frac{\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2}{r^3}.$$

Ранее найденные уровни энергии атома водорода (11.7) вырождены. Каждому значению энергии $E_n$ соответствует $2n^2$ состояний, различающихся величиной орбитального момента, его проекции и проекции спина. Этим состояниям соответствуют волновые функции (13.9). Запишем их в виде

$$\psi_{nlm_lm_s}(r,\ \theta,\ \varphi), \tag{16.25}$$

где $m_l$ и $m_s$ — квантовые числа проекций орбитального и спинового моментов.

Существует и другая система состояний электрона в атоме водорода. О ней говорилось в § 15, п. 3. В этих состояниях имеют определенные значения энергии, орбитальный момент, полный момент импульса и его проекции $J_z$ (и, конечно, спин).

Они задаются квантовыми числами $n$, $l$, $j$ и $m_j$. Соответствующие волновые функции могут быть получены как некоторые линейные комбинации функций (16.25).

Заметим, что уровни энергии по-прежнему определяются формулой (11.17) и также $2n^2$ кратно вырождены, но теперь по квантовым числам $l$, $j$ и $m_j$.

Обозначим новые функции состояния через $\psi_{nljm_j}$. Они являются общими собственными функциями операторов: $\widehat{H}_0=\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta-\frac{\varkappa e^2}{r}$, $\widehat{L}^2$, $\widehat{J}^2$ и $\widehat{J}_z$ (а также $\widehat{S}^2$). Радиальная часть волновых функций $\psi_{nljm_j}$ такая же, как и функций $\psi_{nlm_lm_s}$.

Выберем функции $\psi_{nljm_j}$ в качестве волновых функций невозмущенной системы. При этом значение $\overline{(r^{-3})}$ не изменится. В то же время новые функции состояния являются собственными функциями оператора $\widehat{\vec{L}}\,\widehat{\vec{S}}$. Согласно (16.24)

$$(\widehat{\vec{L}}\,\widehat{\vec{S}})\,\psi_{nljm_j}=\frac{\hbar^2}{2}[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)]\,\psi_{nljm_j}.$$

Поэтому матрица оператора возмущения (16.22) оказывается диагональной по квантовым числам $j$, $l$, $m_j$. Отличные от нуля матричные элементы таковы:

$$\frac{1}{2}C\hbar^2[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)],$$

причем

$$j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)=\begin{cases} l, & j=l+\frac{1}{2},\\ -(l+1), & j=l-\frac{1}{2},\\ 0, & l=0,\ j=s,\end{cases}$$

$$\overline{(r^{-3})}_{nl}=A_{nl}.$$

Уровни энергии атома в первом приближении теории возмущений примут значения:

$$E_{nl}^{(1)}=E_n^{(0)}+\Delta E_{nl}^{(1)}=-\frac{Ry}{n^2}+\frac{1}{2}C\hbar^2A_{nl}[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)]. \qquad (16.26)$$

Поправка $\Delta E_{nl}$ зависит от квантового числа $l$. Поэтому вырождение по орбитальному квантовому числу снимается. Все уровни энергии в $p$-, $d$-, ...-термах расщепляются на два подуровня, различающиеся квантовым числом $j$. На рисунке 16.1 изображена схема возникновения дублета $L_\alpha$. Уровень энергии $2p$ распадается на два подуровня с $j=\frac{3}{2}$ и $j=\frac{1}{2}$. Для $s$-состояний расщепления нет. Поэтому переход с

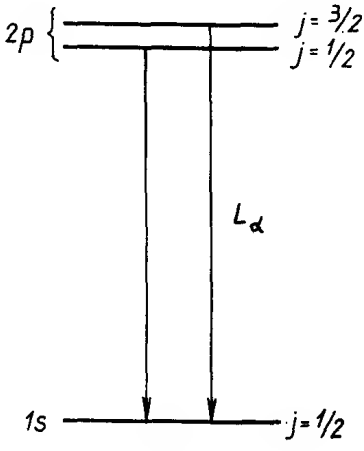



Рис. 16.1.

обоих подуровней $2p$ в состоянии $1s$ дает спектральный дублет $L_\alpha$. Удвоение линий можно обнаружить только с помощью спектральных приборов с достаточно высокой разрешающей способностью, так как расстояние между компонентами дублетов в тонкой структуре уровней очень мало. Оно составляет $10^{-5}...10^{-6}$ эВ, тогда как разность энергий невозмущенных уровней $E_{2p}-E_{1s}\approx 10$ эВ.

Но и уточненные уровни энергии (16.26) не совпадают еще с лучшими экспериментальными значениями энергии атома водорода. Выясним причины несовпадения.

Во-первых, наряду со спин-орбитальным взаимодействием необходимо учитывать еще несколько поправок на релятивистские эффекты в движении электрона. Если выполнить этот расчет, то получится известная формула тонкой структуры уровней энергии:

$$E_{nj}=-\frac{Ry}{n^2}\left[1+\frac{\alpha}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right], \qquad (16.27)$$

где

$$\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c\hbar}$$

— безразмерная постоянная, близка к $\frac{1}{137}$. Она называется *постоянной тонкой структуры.*

Во-вторых, спин-орбитальное взаимодействие не единственное магнитное взаимодействие в атоме. Нужно учитывать существование магнитного момента протона. Обозначим через $\vec{F}$ полный механический момент атома, включающий в себя и спин протона:

$$\hat{\vec{F}}=\hat{\vec{J}}+\hat{\vec{S}}_p.$$

Значения $F$ определяются условием квантования:

$$F=\hbar\sqrt{i(i+1)}.$$

Квантовое число $i$ в соответствии с правилами сложения моментов принимает два значения:

$$i=j\pm\frac{1}{2}.$$

Учет магнитного взаимодействия электрона с ядром атома приводит к расщеплению уровней энергии (16.27) на два подуровня, различающиеся квантовым числом $i$. Например, в состоянии $1s$ $j=\frac{1}{2}$. Поэтому имеем два подуровня с $i=1$ и $i=0$. Они соответствуют одинаковой ($i=1$) и противоположной ($i=0$) ориентациям спинов частиц. Уровень с $i=1$ расположен выше по шкале энергий. Расстояние между подуровнями порядка $6\cdot10^{-6}$ эВ. Соответствующий квантовый переход наблюдается в виде *радиоизлучения на волне 21 см* облаков межзвездного газа.

Теперь, казалось бы, все взаимодействия в атоме учтены, и особенности его устройства выяснены во всех деталях. Однако в 1948 г. Лэмб и Ризерфорд обнаружили сдвиг уровня $2s$, не предсказанный теорией. Этот эффект был объяснен квантовой электродинамикой.

Дело в том, что согласно современным физическим представлениям вакуум не является абсолютной пустотой, полным отсутствием какой-либо материи. Вакуум есть особое, наинизшее по энергии состояние квантовых полей, в том числе электромагнитного. Сдвиг уровня происходит вследствие взаимодействия электрона с «физическим вакуумом».

Трудно сказать, все ли учтено в вышесказанном об атоме водорода: неизвестно, какие еще сюрпризы заготовила нам природа.

## Методические указания и рекомендации

**I.** В пятой главе мы возвращаемся к изучению общих принципов и аппарата квантовой механики, теперь это делается для системы микрочастиц. Центральное положение здесь занимают принцип тождественности и принцип Паули. Вводимые общие выражения симметричных и антисимметричных функций будут использоваться в курсе далее.

Важен для приложений вопрос о моменте импульса системы, сложении моментов. Мы дали в § 15 достаточно последовательное его изложение с выводом всех основных формул. Однако возможен и упрощенный вариант: дать правило сложения через соотношение (15.7) и проиллюстрировать его примерами.

Конечно, принципиальное значение имеет изложение элементов теории возмущений. В курсе анализ доведен до второго приближения, но возможно ограничиться и первым, сообщая поправку к энергии второго приближения в готовом виде. (Далее в курсе она потребуется.)

Материал § 16, п. 4 предназначен для дополнительного чтения или семинарских занятий, возможна курсовая работа.

**II.** При изучении материала главы студентам полезно контролировать усвоение, отвечая на вопросы и выполняя упражнения:

— Сопоставьте аксиоматические положения механики частицы и системы частиц. Обобщите основные понятия механики частицы на систему. Всесторонне обсудите невозможность различения микрочастиц одного и того же вида друг от друга в одном и том же состоянии. Покажите, как влияет принцип тождественности на операторы и функции состояния. Запишите общий вид симметричных и антисимметричных функций состояния для системы из двух, трех частиц без учета спина, с учетом спина. Обсудите различные формулировки принципа Паули. Переформулируйте принцип Паули, используя понятия об энергетическом уровне и ориентации спина.

— Выпишите правила сложения моментов импульса и проиллюстрируйте их графически при сложении двух моментов.

— Примените теорию возмущений в качественном анализе снятия вырождения уровней энергии некоторой системы за счет возмущения.

Выполните упражнения к главе.

### Упражнение V

**1.** Правила коммутации проекций моментов импульса $\hat{\vec{L}}_1$ и $\hat{\vec{L}}_2$ выражаются формулами (10.2). Покажите, что они справедливы и для проекций суммарного момента: $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}_1 + \hat{\vec{L}}_2$.

Решение.

Учтем, что операторы, относящиеся к разным подсистемам, коммутируют между собой:

$$\hat{L}_x=\hat{L}_{1x}+\hat{L}_{2x},\ \hat{L}_y=\hat{L}_{1y}+\hat{L}_{2y},\ \hat{L}_z=\hat{L}_{1z}+\hat{L}_{2z},$$
$$[\hat{L}_x,\ \hat{L}_y]=[(\hat{L}_{1x}+\hat{L}_{2x}),\ (\hat{L}_{1y}+\hat{L}_{2y})]=$$
$$=[\hat{L}_{1x},\ \hat{L}_{1y}]+[\hat{L}_{1x},\ \hat{L}_{2y}]+[\hat{L}_{2x},\ \hat{L}_{1y}]+[\hat{L}_{2x},\ \hat{L}_{2y}]=i\hbar\hat{L}_{1z}+i\hbar\hat{L}_{2z}=i\hbar\hat{L}_z.$$

**2.** Покажите, что $[\hat{L}^2,\ \hat{L}_z]=0$, где $\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{L}}_1+\hat{\vec{L}}_2$.

У к а з а н и е. Воспользуйтесь результатами решения задач 4.11 и 5.1.

**3.** Докажите справедливость перестановочных соотношений (15.4) и (15.5).

Р е ш е н и е.

Покажем, что коммутируют операторы $\hat{L}_1^2$ и $\hat{J}^2$. Оператор $\hat{L}_1^2$ коммутирует с каждой из проекций моментов $\hat{\vec{L}}_1$ и $\hat{\vec{L}}_2$. Отсюда следует перестановочное соотношение $[\hat{L}_1^2,\ \hat{L}_{1x}+\hat{L}_{2x}]=0$ и еще два, аналогичных ему. Замечая, что $\hat{\vec{L}}_1\hat{\vec{L}}_2=\hat{L}_{1x}\hat{L}_{2x}+\hat{L}_{1y}\hat{L}_{2y}+\hat{L}_{1z}\hat{L}_{2z}$, получаем $[\hat{L}_1^2,\ \hat{\vec{L}}_1\hat{\vec{L}}_2]=0$ Это позволяет доказать, что

$$[\hat{L}_1^2,\ \hat{J}^2]=0.$$

**4.** С помощью теории возмущений покажите, что запрет Паули справедлив и для систем взаимодействующих частиц.

Р е ш е н и е.

Допустим, что взаимодействие частиц рассматривается как малое возмущение. Состояние невозмущенной системы описывается такими волновыми функциями, которые обращаются в нуль, если две частицы находятся в одном квантовом состоянии. Волновые функции первого приближения представляют собой линейные комбинации функций состояния невозмущенной системы. Поэтому в первом приближении также выполняется запрет Паули. По тем же причинам он справедлив в любом приближении.

# ГЛАВА VI. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

Применим законы механики системы микрочастиц к атомам — системам, состоящим из ядра и нескольких (от двух у гелия до 92 у урана) электронов. Для изучения многоэлектронных атомов характерно применение приближенных методов, в частности теории возмущений. В нашем курсе даются в основном качественные представления о теории строения многоэлектронных атомов, необходимые для понимания их общих свойств, физических основ объединения элементов в таблицу Менделеева, природы химической связи.

## § 17. АТОМ ГЕЛИЯ

**17.1. Энергия и функция состояния атома гелия в нулевом приближении теории возмущений.** Атом гелия с двумя электронами — система уже достаточно сложная; исследовать ее приходится приближенными методами. Если пренебречь магнитными взаимодействиями, которые гораздо слабее электрических, то гамильтониан системы двух электронов, взаимодействующих между собой и с ядром гелия примет вид

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{2\varkappa e^2}{r_1}-\frac{2\varkappa e^2}{r_2}+\frac{\varkappa e^2}{r_{12}}. \qquad (17.1)$$

Здесь $\Delta_1$ и $\Delta_2$ — операторы Лапласа по координатам первого и второго электронов; $r_1$ и $r_2$ — операторы расстояний частиц до ядра; $r_{12}$ — оператор расстояния между электронами; $m$ — масса электрона (ядро считается неподвижным).

Для уравнения Шредингера с оператором Гамильтона (17.1) точное решение неизвестно. Поэтому применим теорию возмущений. Рассмотрим систему из двух невзаимодействующих электронов в поле ядра. Ее мы используем для введения нулевого приближения при изучении атома гелия.

Итак, уравнение Шредингера для невозмущенной системы:

$$\widehat{H}_0 f=Ef$$

содержит гамильтониан:

$$\widehat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{2\varkappa e^2}{r_1}-\frac{2\varkappa e^2}{r_2}.$$

Как известно, волновая функция системы невзаимодействующих частиц может быть представлена в виде произведения:

$$f_{n_1n_2}(\vec{r}_1\vec{r}_2)=\psi_{n_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{n_2}(\vec{r}_2), \qquad (17.2)$$

где $n_1$ и $n_2$ — совокупности квантовых чисел, определяющих состояния частиц. Энергия системы определяется формулой

$$E_{n_1n_2}=E_{n_1}+E_{n_2}.$$

Уровни энергии $E_n$ и функции $\psi_n(\vec{r})$ находятся из решения уравнения Шредингера для одной частицы:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{2\varkappa e^2}{r}\right)\psi_n(\vec{r})=E_n\psi_n(\vec{r}). \qquad (17.3)$$

Система, которая описывается уравнением (17.3), является водородоподобной. Это позволяет сразу записать решение:

$$E_n=-\frac{4Ry}{n^2},$$

$$\psi_n(\vec{r})=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\,\varphi),$$

где $\psi_n(\vec{r})$ — водородоподобные волновые функции, соответствующие

иону $He^+$ (о функциях $\psi_n(\vec{r})$ и уровнях энергии см. § 11, п. 4).

Для описания состояния системы фермионов нужно использовать симметричные или антисимметричные комбинации координатных функций (17.2). Как показано в § 14,

$$f_C = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{n_2}(\vec{r}_2) + \psi_{n_1}(\vec{r}_2)\,\psi_{n_2}(\vec{r}_1)], \tag{17.4}$$

$$f_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{n_2}(\vec{r}_2) - \psi_{n_1}(\vec{r}_2)\,\psi_{n_2}(\vec{r}_1)]. \tag{17.5}$$

Но если оба электрона находятся в одном и том же состоянии, ($n_1 = n_2 = n$), то симметричную функцию можно записать проще:

$$f_c = \psi_n(\vec{r}_1)\,\psi_n(\vec{r}_2) \tag{17.6}$$

(Подчеркнем, что спиновое число $m_s$ в набор $n$ не входит. Согласно запрету Паули в этом случае состояния электронов отличаются ориентацией спинов.)

Таким образом, мы располагаем решением задачи об атоме гелия без учета взаимодействия между электронами, или в нулевом приближении.

**17.2. Классификация состояний атома гелия. Парагелий и ортогелий.** Состояние атома гелия, определяющее энергию в нулевом приближении, задают, указывая состояния обоих электронов — главное и орбитальное квантовые числа каждого электрона. При этом вместо орбитального числа указывается обозначающая его буква (см. § 10). Например, возможны состояния с конфигурацией электронов: ($1s$, $1s$), ($1s$, $2s$), ($1s$, $2p$) и т. д.

Основной уровень энергии в нулевом приближении равен:

$$E_{11}^{(0)} = -8Ry \simeq -109 \text{ эВ}.$$

Ему соответствует только одно квантовое состояние $1s$, $1s$ (или $(1s)^2$). Первый возбужденный уровень в том же приближении

$$E_{1,2}^{(0)} = -5Ry \simeq -68 \text{ эВ}.$$

Этим значением энергии обладают атомы гелия в состояниях $1s\,2s$ и $1s$, $2p$.

Таким образом, уровень $E_{1,2}$ вырожден по орбитальному квантовому числу одного из электронов. Кроме того, он вырожден по магнитному квантовому числу (по ориентации орбитального момента) и по спину частиц. Имеется и дополнительное двукратное вырождение, связанное с использованием симметричных и антисимметричных волновых функций. Эти выводы справедливы, конечно, и для других уровней энергии гелия.

При учете электрических и магнитных взаимодействий между электронами приходится указывать *полный орбитальный, полный спиновый* и *полный (орбитальный* плюс *спиновый) механический моменты* атома и применять более детальную классификацию состояний, нежели конфигурация электронов.

Полный орбитальный момент атома находится путем сложения моментов импульса отдельных электронов, задаваемых числами $l_i$,

по которым находится $l$. Состояния атомов с различными значениями полного орбитального момента обозначаются прописными буквами латинского алфавита:

| $l$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ... |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Символ | $S$ | $P$ | $D$ | $F$ | $G$ | $H$ | .. |

(Обозначения в таблице находятся в согласии с буквенной символикой для состояний одной частицы в центрально-симметричном поле, см. § 10.)

Для гелия характерно, что энергия однократной ионизации атома меньше, чем энергия, необходимая для возбуждения обоих электронов. Поэтому все возбужденные состояния атома гелия находятся как комбинации состояния $1s$ с другими более высокими водородоподобными состояниями. Орбитальный момент атома гелия сводится поэтому к орбитальному моменту одного из электронов: $l=l_1$ ($l_2=0$).

Спиновые моменты складываются в полный спиновый момент атома. Квантовое число полного спина для гелия принимает только два значения: $s=0$ и $s=1$. *Состояния атома с нулевым спином называются парасостояниями, с единичным спином — ортосостояниями.* Соответственно говорят о парагелии и ортогелии.

В атомной физике для состояний и уровней с одинаковыми квантовыми числами $l$, $j$, $s$ часто используется название *терм*. В обозначение терма входят буква, указывающая квантовое число $l$, цифра слева вверху есть $2s+1$, справа внизу пишется квантовое число $j$. Для парагелия возможны термы: ${}^1S_0$, ${}^1P_1$, ... Термы ортогелия: ${}^3P_0$, ${}^3P_1$, ${}^3P_2$, ...

Полезно заметить, что одни и те же термы имеют место при различных электронных конфигурациях. Поэтому для полного задания состояния указываются электронная конфигурация и терм. Так, основное состояние парагелия $(1s,\ 1s)$, ${}^1S_0$, а ортогелия — $(1s,\ 2s)$, ${}^3S_1$. (Состояние $(1s,\ 1s)$, ${}^3S_1$ не реализуется в природе вследствие действия запрета Паули.)

Классификация состояний атома гелия с указанием электронной конфигурации и термов распространяется и на другие многоэлектронные атомы. В ней отражена последовательность учета взаимодействий в порядке роста их интенсивности.

Так, если учтено только взаимодействие электронов с ядром, то по заданной конфигурации электронов, как это проделывалось выше, определяется уровень энергии атома в нулевом приближении.

Далее, если учесть следующее по величине электрическое взаимодействие электронов между собой, то моменты импульса отдельных электронов не сохраняются, а определенное значение в стационарном состоянии системы имеет полный орбитальный момент состояния. Если указан полный орбитальный момент, то ему соответствует уровень энергии системы электронов с учетом их электрического взаимодействия между собой. (Соответствующие уровни энергии вычисляются ниже.)

Наконец, если учтены и магнитные взаимодействия между электронами, то надо принимать в расчет и спиновые моменты. Теперь имеет определенное значение в стационарном состоянии только полный механический момент системы, *каждому значению* $j$ соответствует уровень энергии.

Рассмотрим подробно состояния атома гелия.

У парагелия $s=0$, поэтому при заданном $l$ имеется только одно состояние с $j=l$.

Для ортогелия существуют три состояния, отличающиеся значениями полного механического момента $j$. Эти три состояния отличаются ориентациями полного спинового момента относительно орбитального. Следовательно, и магнитный спиновый момент трояко ориентируется относительно орбитального магнитного момента атома, что приводит к трем различным значениям энергии спин-орбитального взаимодействия. Уровни энергии парагелия, соответствующие состояниям с различными $j$, весьма близки друг к другу, так как различие уровней возникает за счет относительно малого магнитного взаимодействия.

Итак, уровни энергии при заданном $l$ группируются в так называемые *мультиплеты*. В данном случае это *триплеты* ортогелия. Число компонентов тонкой структуры уровней энергии — мультиплетность — равно в общем случае $2s+1$ (что и указывается цифрой у терма).

Используя результаты § 14, п. 4 и § 15, п. 3, можно сделать вывод, что *ортогелий* должен описываться *антисимметричными* координатными функциями (17.5), а *парагелий — симметричными* функциями (17.4) или (17.6).

Электроны в атоме парагелия имеют противоположные ориентации спинов, а в атоме ортогелия спины электронов направлены в одну сторону. Переход атома гелия из ортосостояния в парасостояние (или обратно) требует изменения ориентации спинов и вида симметрии координатной части волновой функции системы. Такая глубокая перестройка состояния атома может произойти только за счет магнитного взаимодействия, имеющего малую интенсивность. Поэтому названные переходы весьма редки. Получаются как бы два сорта атомов: парагелий и ортогелий, отличающиеся друг от друга по некоторым свойствам. Природный гелий представляет собой смесь обоих видов атомов.

(Если все состояния с разными ориентациями спинов равновероятны, то содержание ортогелия в три раза больше, чем парагелия.)

Атом ортогелия имеет в основном состоянии неравный нулю магнитный момент, а парагелий таким моментом не обладает. Поэтому ортогелий относится к парамагнитным веществам, а парагелий — к диамагнитным. Отличаются они и по спектру. Ниже будет показано, что энергии одноименных по конфигурации и по квантовому числу $l$ состояний парагелия и ортогелия не совпадают. Кроме того, спектральные линии ортогелия и парагелия, как уже говорилось, имеют разную мультиплетность.

**17.3. Уровни энергии атома гелия в первом приближении теории возмущений.** Учтем электрическое взаимодействие электронов. Оператор возмущения в данном случае

$$\hat{w}=\frac{ke^2}{r_{12}}. \tag{17.7}$$

Поправка к уровням энергии находится по формулам (16.8) или (16.21).

Для основного состояния парагелия имеем

$$\Delta E_{11}^{(1)}=\int \psi_{1s}^{*}(\vec{r}_1)\,\psi_{1s}^{*}(\vec{r}_2)\,\frac{\varkappa e^2}{r_{12}}\,\psi_{1s}(\vec{r}_1)\,\psi_{1s}(\vec{r}_2)\,dV_1dV_2. \qquad (17.8)$$

Водородоподобные волновые функции для $s$-состояний действительны и не зависят от угловых переменных. Это позволяет упростить запись выражения (17.8):

$$\Delta E_{11}^{(1)}=\varkappa e^2\int \psi_{1s}^{2}(r_1)\,\psi_{1s}^{2}(r_2)\,\frac{dV_1dV_2}{r_{12}}\,.$$

Вычисление интеграла дает значение поправки:

$$\Delta E_{11}^{(1)}=\frac{5}{2}\,Ry.$$

Тогда уровень энергии в первом приближении находится так:

$$E_{11}^{(1)}=E_{11}^{(0)}+\Delta E_{11}^{(1)}=-5{,}5R_y\simeq -75\ \text{эВ}.$$

Полученное значение много ближе к экспериментальному ($-79$ эВ), чем $E_{11}^{(0)}$. Тем не менее точность первого приближения нельзя считать высокой. Это объясняется тем, что оператор возмущения (17.7) не мал, как это должно быть, по сравнению со слагаемыми $\frac{2\varkappa e^2}{r_1}$, $\frac{2\varkappa e^2}{r_2}$ в гамильтониане (17.1). Поэтому при нашем способе расчета можно надеяться только на качественно верное описание атома гелия.

Рассмотрим еще состояния $(1s,\ 2s)$, $^1S_0$ и $(1s,\ 2s)$, $^3S_1$ Они описываются волновыми функциями

$$f_{1s\ 2s}=\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_{1s}(\vec{r}_1)\,\psi_{2s}(\vec{r}_2)\pm\psi_{1s}(\vec{r}_2)\,\psi_{2s}(\vec{r}_1)], \qquad (17.9)$$

где нужно взять знак «+» для парагелия и «—» — для ортогелия. Функции (17.9) действительны и зависят только от расстояний электронов до ядра. Поправка первого порядка к уровням энергии нулевого приближения:

$$\Delta E_{1,2}^{(1)}=\frac{\varkappa e^2}{2}\int [\psi_{1s}(\vec{r}_1)\,\psi_{2s}(\vec{r}_2)\pm\psi_{1s}(\vec{r}_2)\,\psi_{2s}(\vec{r}_1)]^2\,\frac{dV_1dV_2}{r_{12}}=$$

$$=\frac{\varkappa e^2}{2}\int \psi_{1s}^{2}(\vec{r}_1)\,\psi_{2s}^{2}(\vec{r}_2)\,\frac{dV_1dV_2}{r_{12}}+\frac{\varkappa e^2}{2}\int \psi_{1s}^{2}(\vec{r}_2)\,\psi_{2s}^{2}(\vec{r}_1)\,\frac{dV_1dV_2}{r_{12}}\pm$$

$$\pm\varkappa e^2\int \psi_{1s}(\vec{r}_1)\,\psi_{1s}(\vec{r}_2)\,\psi_{2s}(\vec{r}_1)\,\psi_{2s}(\vec{r}_2)\,\frac{dV_1dV_2}{r_{1,2}}\,. \qquad (17.10)$$

Два первых интеграла в (17.10) отличаются обозначениями переменных. Поэтому они равны друг другу. Обозначим сумму этих интегралов через $Q_{12}$. Последний интеграл обозначим буквой $A_{1,2}$. Значение энергии $E_{1,2}^{(1)}$ определяется формулой

$$E_{1\,2}^{(1)}=E_{1,2}^{(0)}+Q_{1,2}\pm A_{1\,2}. \qquad (17.11)$$

К аналогичным выражениям сводится вычисление поправок к

уровням энергии других возбужденных состояний. Вычисление показывает, что интегралы $Q$ и $A$ всегда положительны. Добавка к энергии зависит от симметрии волновых функций. Поэтому в первом приближении снимается вырождение, связанное с двойным знаком в формулах (17.4) и (17.5) для волновых функций. Это означает, что уровни энергии парагелия уже не совпадают с энергией состояний ортогелия при той же электронной конфигурации. Так с качественной стороны теория позволяет объяснить относительное расположение уровней энергии атома гелия. Приведем экспериментальные значения нижних уровней энергии:

| Парагелий | Ортогелий |
|---|---|
| $E_{1,1}((1s1s),\ {}^1S_0) = -78{,}6$ эВ, | $E_{1,2}((1s2s),\ {}^3S_1) = -59{,}2$ эВ, |
| $E_{1\,2}((1s2s),\ {}^1S_0) = -58{,}4$ эВ, | $E_{1\,2}((1s2p),\ {}^3P_{0,1,2}) = -58{,}0$ эВ. |

Обратим внимание на полученный важный результат: электрическое взаимодействие между электронами приводит к зависимости уровней энергии от суммарного спина системы. Влияние спина здесь не прямое — это не энергия магнитного взаимодействия, а косвенное: энергии различны потому, что различны симметрии волновых функций.

Далее следует учесть магнитные взаимодействия. Появляются качественно новые результаты. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к тонкой структуре уровней ортогелия: возникает различие в энергии состояний с одним и тем же орбитальным моментом $l$, но с разной величиной полного механического момента атома. Уровни энергии распадаются на тесные триплеты (рис. 17.1). Но об этом говорилось выше.

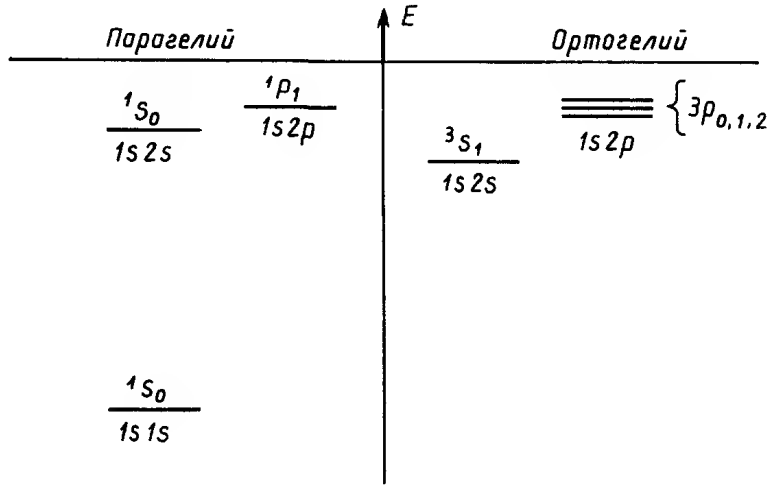



Рис 17.1. Структура нижних уровней энергии атома гелия (дана не в масштабе).

Оператор спин-орбитального взаимодействия имеет вид

$$\hat{V}=a\hat{\vec{S}}\hat{\vec{L}},$$

где $a$ — постоянная, зависящая от состояния системы.

Из формулы

$$\hat{\vec{J}}^2=(\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}})^2=\hat{L}^2+\hat{S}^2+2\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}$$

следует

$$\hat{V}=\frac{a}{2}(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2).$$

Поправка к энергии за счет спин-орбитального взаимодействия найдется как среднее значение этого оператора по волновым функциям состояний с заданными значениями $j$, $l$ и $s$. Они являются собственными для оператора $\hat{V}$. Поэтому

$$\Delta E_{ls}=\text{const}\,[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)].$$

Отсюда видно, что $\Delta E_{ls}$ имеет три разных значения при $j=l+1$, $j=l$ и $j=l-1$.

**17.4. Энергия обменного взаимодействия.** Рассмотрим подробнее формулы (17.10) и (17.11). Воспользуемся полуклассической моделью электронного облака. Согласно этой модели заряд электрона, находящегося в водородоподобном состоянии $(n, l)$, распределен в пространстве с плотностью

$$\rho_{nl}=-e|\psi_{nl}(\vec{r})|^2.$$

Интеграл $Q_{1,2}$ можно интерпретировать как выражение энергии электростатического взаимодействия двух распределенных в пространстве электрических зарядов с плотностями $\rho_{1s}$ и $\rho_{2s}$:

$$Q_{1,2}=\varkappa\int\frac{\rho_{1s}(\vec{r}_1)\,\rho_{2s}(\vec{r}_2)}{r_{12}}\,dV_1dV_2.$$

Таким образом, величина $Q_{1,2}$ определяет энергию кулоновского отталкивания с учетом волновых особенностей поведения частиц, а именно отсутствия их точного местоположения в пространстве. (Однако модель электронного облака не исчерпывает все особенности в движении электрона, что в данной задаче проявляется в появлении второго интеграла $A_{12}$.)

Обратимся к интегралу $A_{1,2}$. Его толкование как энергии электростатического взаимодействия электронных облаков возможно при условии, что в качестве плотности заряда выступают величины $-e\psi_{1s}(\vec{r}_1)\,\psi_{2s}(\vec{r}_1)$ и $-e\psi_{1s}(\vec{r}_2)\,\psi_{2s}(\vec{r}_2)$.

Это означает, что каждый из электронов в процессе взаимодействия не находится в определенном квантовом состоянии. Частицы совершают переходы из состояния $1s$ в состояние $2s$ и обратно. Электроны как бы обмениваются состояниями. Поэтому интеграл $A_{1,2}$ (и подобные ему) носит название обменного интеграла; он выражает обменную энергию.

(Заметим еще раз, что не следует буквально понимать эти термины и считать обмен состояниями процессом, происходящим во

времени и в пространстве. Это лишь более или менее наглядное толкование математических выражений, к которым приводит аппарат квантовой механики.)

Возникновение обменной энергии и обменного взаимодействия связано с учетом тождественности частиц, с необходимостью описывать состояния системы функциями того или иного класса симметрии. В классической физике нет понятия о тождественности, поэтому не существует классических величин, аналогичных обменному интегралу. Однако наличие обменного взаимодействия не вызвано новыми фундаментальными силами природы, проявляющимися только в микромире. Между электронами в атоме гелия действуют известные силы электромагнитного происхождения. Но неразличимость частиц накладывает свой отпечаток на все явления в атоме, в том числе и на электрическое взаимодействие. Выявленная выше корреляция в движении частиц (определяемом функцией состояния) и ориентации их спинов сказывается на величине энергии отталкивания.

При расчете обменного интеграла $A$ важное значение приобретает область пространства, в которой волновые функции $\psi_1$ и $\psi_2$ одновременно заметно отличны от нуля, ибо от ее величины сильно зависит численное значение $A$. Говорят о *перекрывании* волновых функций обоих электронов. Если перекрывания нет, то $A=0$. Отсюда видно, что обменное взаимодействие существенно только для близкорасположенных частиц.

Рассмотрим выражение для волновых функций (17.9). Для ортогелия функция $f_{1s,2s}$ равна нулю, если оба электрона находятся в одной точке ($\vec{r}_1=\vec{r}_2$). Поэтому среднее расстояние между электронами в ортогелии больше, чем в парагелии (при одной и той же электронной конфигурации). Это приводит к уменьшению отталкивания и в целом к меньшей энергии состояния ($1s$, $2s$), $^3S_1$ по сравнению с энергией состояния ($1s$, $2s$), $^1S_0$. Еще раз подчеркнем, что зависимость энергии атома от спина здесь не связана с магнитными взаимодействиями. Она существует как эффект, обязанный своим происхождением тождественности частиц.

Обменное взаимодействие должно иметь место в системах любых одинаковых частиц, какие бы фундаментальные силы их ни связывали. В самом деле, решая уравнение Шредингера, функции состояния определяют по заданному взаимодействию без учета обменного, а при расчете уровней энергии в первом приближении теории возмущений с помощью этих найденных волновых функций с учетом класса их симметрии обязательно появляются обменные интегралы.

Обменное взаимодействие играет большую роль в природе. Обменный характер имеют силы, обусловливающие ковалентную химическую связь, образование кристаллов, явление ферромагнетизма. Обменное взаимодействие сказывается на свойствах атомных ядер, им объясняются многие особенности взаимодействия элементарных частиц.

## § 18. СТРУКТУРА И СОСТОЯНИЯ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

**18.1. Уровни энергии валентного электрона в щелочном атоме.** Целый ряд экспериментальных и теоретических данных свидетельствует о том, что электроны в многоэлектронном атоме в хорошем приближении могут рассматриваться как независимые частицы, движущиеся в центрально-симметричном поле. Достаточно наглядным примером, иллюстрирующим правильность высказанного положения, является движение валентного электрона в атомах щелочных элементов.

Элементы этой группы: Li, Na, K, Rb, Cs — имеют некоторые химические свойства, напоминающие свойства водорода. В их спектрах наблюдаются серии линий, сходные по структуре с водородными. Поэтому есть основание считать, что основную роль в химических и оптических свойствах щелочных элементов играет внешний электрон, называемый *валентным* или *оптическим*. Все другие электроны здесь вместе с ядром образуют устойчивую систему, похожую на атом инертных газов. В поле ядра и внутренних электронов — *электронного остова* — движется внешний электрон.

Предполагается, что электрическое поле ядра и электронного остова в дипольном приближении имеет вид

$$U = -\frac{\varkappa e^2}{r} - \frac{\varkappa \vec{p}\vec{n}}{r^2}\left(\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}\right).$$

Первое слагаемое описывает взаимодействие валентного электрона с ядром с учетом экранирующего действия внутренних электронов, входящих в остов. Поэтому в числителе стоит величина $\varkappa e^2$, равная $\varkappa e^2 [Z - (Z-1)]$. Второе слагаемое обусловлено дипольным моментом остова. Следует заметить, что система, состоящая из ядра и внутренних электронов, имеет стационарную и симметричную конфигурации. Ее собственный дипольный момент равен нулю. Однако небольшой дополнительный дипольный момент возникает за счет поляризации электронного облака остова внешним электроном. Знак минус перед вторым слагаемым стоит потому, что взаимодействие валентного электрона с наведенным дипольным моментом должно иметь характер притяжения. (Движение валентного электрона вызывает изменение ориентации дипольного момента $\vec{p}$.)

Предположим $\varkappa \vec{p}\vec{n} = C$ и запишем оператор потенциальной энергии в виде

$$U = -\frac{\varkappa e^2}{r} - \frac{C}{r^2}. \qquad (18.1)$$

Слагаемое $-\frac{C}{r^2}$ охватывает с качественной стороны и другой, более значительный эффект; это неполное экранирование заряда ядра внутренними электронами вследствие квантового характера движения внешнего электрона. Валентный электрон, проникая внутрь остова, испытывает дополнительное притяжение к ядру.

Таким образом, получаем стационарное центрально-симметричное поле с потенциалом $U$, который часто называют *эффективным* (так как он выражает некоторый суммарный результат взаимодействия движущихся частиц без прямого учета их движения). Эффективный потенциал поля многоэлектронного атома не сводится к кулоновскому. Решим задачу о движении внешнего электрона в этом поле.

Известна угловая часть волновой функции для частицы, находящейся в поле с центральной симметрией (см. § 10). Для нахождения радиальной части требуется решить уравнение (10.16). В данном случае радиальное уравнение имеет вид

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+\frac{\varkappa e^2}{r}+\frac{C}{r^2}-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R=0.$$

Введем обозначение:

$$l'(l'+1)=l(l+1)-\frac{2\mu C}{\hbar^2}, \qquad (18.2)$$

после чего уравнение упрощается:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+\frac{\varkappa e^2}{r}-\frac{\hbar^2 l'(l'+1)}{2\mu r^2}\right]R=0$$

и совпадает по виду с радиальным уравнением для атома водорода (11.2). Это позволяет воспользоваться результатами решения задачи об атоме водорода для нахождения функции $R(r)$ и уровней энергии. Соответствующие соотношения получаются из формул (см. § 11) простой заменой $l$ на $l'$.

В частности, формула (11.6) для главного квантового числа примет вид

$$n'=n_r+l'+1,$$

а формула для энергии (11.7) запишется с учетом теперь нецелочисленных значений и $n'$ и $l'$:

$$E=-Ry\frac{1}{(n_r+l'+1)^2}.$$

Удобнее выражать энергию как функцию целых квантовых чисел $l$ и $n$. Из квадратного уравнения (18.2) следует, что

$$l'\simeq l-\frac{2\mu\varkappa Ce^2}{\hbar^2(2l+1)},$$

т. е. поправка к квантовым числам $l$ и $n$ имеет величину

$$\sigma(l)=\frac{2\mu\varkappa Ce^2}{\hbar^2(2l+1)}. \qquad (18.3)$$

(Из двух решений квадратного уравнения выбрано то, которое уменьшает числа $l'$ и $n'$, что соответствует понижению уровня энергии за счет дополнительного притяжения электрона к центру. Кроме того, корень квадратный в решении уравнения (18.2) извлечен приближенно ввиду малости постоянной $C$.)

В результате получаем для уровня энергии оптического электрона атома щелочного элемента выражение

$$E_{nl} = -Ry \frac{1}{[n-\sigma(l)]^2}. \qquad (18.4)$$

Из формул (18.4) и (18.3) видно, что уровни энергии щелочного атома оказываются зависящими не только от главного квантового числа $n$, но и от азимутального квантового числа $l$. Каждый водородный уровень энергии, соответствующий определенному $n$, разбивается на близкие подуровни по всем значениям: $l=0, 1, ..., n-1$. Таким образом, энергия взаимодействия зависит от формы электронного облака валентного электрона. В этом случае говорят о снятии вырождения по квантовому числу $l$ благодаря некулоновскому характеру потенциала взаимодействия внешнего электрона с остовом.

Поправка $\sigma(l)$ понижает значения энергии щелочного атома по отношению к уровням энергии тех же состояний атома водорода. Ее влияние тем заметнее, чем меньше главное квантовое число $n$; при заданном $n$ больше сдвиг уровней с меньшим $l$.

Все это хорошо видно на диаграмме состояний атома Li на рисунке 18.1 (пунктиром отмечены уровни энергии атома водорода.)

По причинам, которые будут ясны из дальнейшего, валентный электрон в атоме лития не может занимать состояние $1s$. Поэтому в спектре лития нет серии, аналогичной лаймановской. Зато имеется три серии, сходные с серией Бальмера у водорода. Это

1) главная серия (переходы $np-2s$):

$$\nu = \frac{Ry}{2\pi\hbar}\left\{\frac{1}{[2-\sigma(0)]^2} - \frac{1}{[n-\sigma(1)]^2}\right\}, \qquad (18.5)$$

2) первая побочная, или диффузная (переходы $nd-2p$):

$$\nu = \frac{Ry}{2\pi\hbar}\left\{\frac{1}{[2-\sigma(1)]^2} - \frac{1}{[n-\sigma(2)]^2}\right\}; \qquad (18.6)$$

3) вторая побочная, или резкая (переходы $ns-2p$):

$$\nu = \frac{Ry}{2\pi\hbar}\left\{\frac{1}{[2-\sigma(1)]^2} - \frac{1}{[n-\sigma(0)]^2}\right\}. \qquad (18.7)$$

В формулах (18.5)...(18.7) $n$ пробегает значения 3, 4, ... (Изучая расположение линий в сериях, можно найти по экспериментальным данным поправки $\sigma(0)$, $\sigma(1)$ и т. д., а вместе с тем и постоянную $C$.)

Линии главной серии всех щелочных элементов (с переходами типа $s-p$) представляют собой дублеты вследствие расщепления уровней $p$-терма на два подуровня. Вспомним, например, хорошо известную желтую линию спектра натрия. Причина расщепления заключается во взаимодействии спинового магнитного момента электрона с орбитальным. Именно изучение спектров щелочных атомов в свое время привело к идее о существовании спина электрона.

**18.2. Теория периодической системы элементов Д. И. Менделеева.** Одним из наиболее ранних и эффективных результатов, полученных с помощью квантовой механики, явилось качественное теоре-

тическое объяснение периодической системы элементов и строения электронных оболочек атомов, сделанное еще в 1922 г. Н. Бором (см. второй форзац).

С современной точки зрения теория строения электронных оболочек атомов опирается на следующие физические допущения:

1. Структура атома определяется номером элемента $Z$ в периодической системе, совпадающим с зарядом ядра (в элементарных электронных зарядах). Число электронов в атоме равно $Z$, так как атом представляет собой электронейтральную систему из ядра и электронов.

2. Электроны считаются невзаимодействующими друг с другом. Они движутся в постоянном центрально-симметричном поле. Поэтому квантовое состояние каждого электрона определяется числами $n$, $l$, $m$, $m_s$, а уровень энергии — парой чисел $n$, $l$.

3. Число электронов с одинаковой энергией (на одном энергетическом уровне) ограничено запретом Паули: электроны, обладающие одной и той же энергией, находятся в состояниях, отличающихся квантовыми числами $m$, $m_s$.

4. По мере увеличения заряда ядра $Z$ электроны последовательно заполняют состояния $n$, $l$ в порядке роста их энергии.

Средние значения расстояния электронов до ядра определяются в основном квантовым числом $n$, поэтому электроны с одним и тем же значением числа $n$ объединяются в *электронный слой*. Ясно, что электроны в слое обладают близкими значениями энергии. Эти значения, а также среднее расстояние до ядра возрастают с ростом $n$.

Уровень энергии электрона зависит также от орбитального квантового числа $l$, хотя и в значительно меньшей степени, нежели от $n$. Электроны с одними и теми же значениями $n$ и $l$ в рассматриваемом приближении обладают одинаковыми значениями энергии и близкими по форме электронными облаками. Они объединяются в электрон-

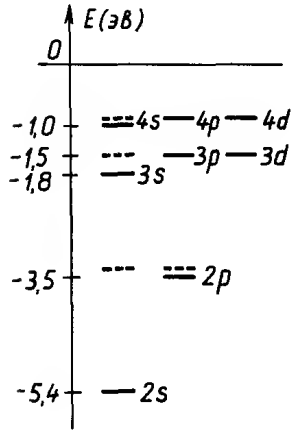



Рис 18 1

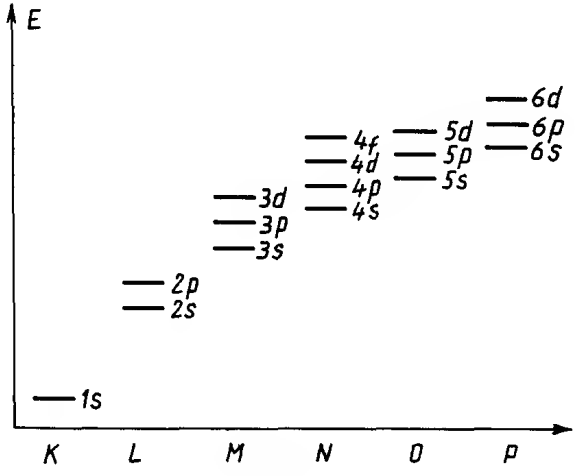



Рис. 18.2.

ную оболочку, входящую в слой $n$. (Вместо термина оболочка часто используется термин *подслой*.)

Оболочка обозначается символом, состоящим из цифры и буквы, соответствующих квантовым числам $n$ и $l$, например $1s$, $2p$ и т. д. Слои обозначаются буквами $K$, $L$, $M$, $N$, $O$, $P$, $Q$ в порядке возрастания главного квантового числа (рис. 18.2). Совокупность всех слоев и оболочек конкретного атома с указанием числа электронов в каждой оболочке называется *электронной конфигурацией*. Электронная конфигурация в общих чертах отражает строение многоэлектронного атома и приближенно характеризует его основное невозбужденное состояние. (Мы уже встречались с этим при изучении атома гелия.)

Электроны в одной оболочке при фиксированных $n$ и $l$ имеют различные значения квантовых чисел $m$ и $m_s$. Максимальное число электронов в оболочке с учетом двух ориентаций спина равно $2(2l+1)$. В таблице приведены числа электронов в заполненных оболочках:

| Оболочка | $s$ | $p$ | $d$ | $f$ | ... |
|---|---|---|---|---|---|
| Максимальное число электронов | 2 | 6 | 10 | 14 | ... |
| Значения числа $m$ | 0 | $0, \pm 1$ | $0, \pm 1, \pm 2$ | $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ | ... |

В одном слое, как известно, $2n^2$ различных квантовых состояний, столько же электронов, если он заполнен.

*Заполнение слоев электронами соответствует периодам элементов в таблице Менделеева.* Поэтому для периодов, казалось бы, возможны числа элементов: 2, 8, 18, 32, 50, ... Действительно, количество элементов в периодах совпадает с указанными числами, но в другой последовательности: 2, 8, 8, 18, 18, 32, а VII период не завершен.

Чтобы понять причину расхождения идеальной схемы заполнения электронных слоев с реальной, обратимся к диаграмме энергетических уровней электронов на рисунке 18.2. (Заметим, что диаграмма только качественно верно передает расположение уровней.) На протяжении первых трех периодов никаких отклонений от идеальной схемы нет, потому что уровни энергии состояний, относящиеся к первым трем слоям, не перекрываются. Но уровень $4s$ в $M$-слое оказывается ниже уровня $3d$ предыдущего $L$-слоя. Это значит, что после оболочки $3p$ начнет заполняться не оболочка $3d$, а оболочка $4s$ следующего $M$-слоя, «откроется» новый, четвертый период. Аналогичное положение дел имеет место и далее, причем энергетически выгодной оказывается следующая последовательность заполнения оболочек и слоев:

| Период | Порядок заполнеиия слоев и оболочек |
|---|---|
| I | $K$; $(1s)^2$ |
| | 2 электрона в заполненной внешней оболочке — 2 элемента в периоде |
| II | $L$; $(2s)^2\,(2p)^6$ |

| | |
|---|---|
| III | 8 электронов в заполненной внешней оболочке — 8 элементов в периоде<br>$M$; $(3s)^2(3p)^6$ |
| IV | 8 электронов во внешней оболочке — 8 элементов в периоде<br>$NMN$; $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$<br>8 электронов во внешней оболочке, 10$d$-электронов завершают заполнение $M$-оболочки — 18 элементов в периоде |
| V | $ONO$; $(5s)^2(4d)^{10}(5p)^6$<br>8 электронов во внешней оболочке, 10 электронов заполняют $d$-слой в $N$-оболочке — 18 элементов в перноде |
| VI | $PNOP$; $(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)^6$<br>8 электронов во внешней оболочке, 14 $f$-электронов завершают заполнение $N$-оболочки, 10 электронов заполняют $d$-слой в $O$-оболочке — 32 элемента в периоде |
| VII | $QOP$; $(7s)^2(5f)^{14}(6d)$...<br>незавершенный период |

Эта последовательность не только полностью объясняет число элементов в периодах, но сходство и различие их оптических и химических свойств, определяющихся числом электронов в последней оболочке. Например, открытие нового по сравнению с аргоном $N$-слоя у девятнадцатого элемента — калия — приводит к появлению одного валентного электрона в состоянии $4s$ при заполненных оболочках $3s$ и $3p$ $M$-слоя аргона. Поэтому получается элемент, сходный с натрием.

Пользуясь таблицей заполнения слоев и оболочек, можно указать состояния всех электронов каждого атома, или его электронную конфигурацию. Например, для железа, порядковый номер которого 26, имеем

$$\mathrm{Fe}:(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^6(4s)^2.$$

Своеобразная ситуация складывается с так называемыми редкоземельными элементами от лантана до лютеция включительно. Лантан занимает 57-ю клетку таблицы. У предыдущих элементов VI периода заполняется оболочка $6s$. При переходе к лантану оболочка $6s$ завершена, поэтому пятьдесят седьмой электрон подсоединяется в состоянии $5d$ с энергией, меньшей, нежели $6p$. Далее энергетически выгодным оказывается подсоединение 14 электронов в не заполненную ранее $4f$-оболочку, что и происходит (с некоторыми отступлениями в пользу $5d$-оболочки, так как имеет место конкуренция $5d$- и $4f$-состояний) у 14 элементов до лютеция. У всех лантанидов на внешней оболочке два электрона, поэтому возникает идентичность их химических свойств. Все эти элементы помещены в одну с лантаном клеточку таблицы. Аналогично обстоит дело с группой актинидов в VII незаконченном периоде системы.

Наличие восьми групп элементов в периодической системе связано с тем, что верхний слой атома любого элемента содержит только $s$- и $p$- электроны, число которых колеблется от 1 до 8. Отсюда возникает близость химических свойств атомов, объединенных в группу.

В высказанных в начале параграфа допущениях, на которых построена теория электронных оболочек атома, содержится явное приближение: не полностью учитываются электрические и совсем не

учитываются магнитные взаимодействия между электронами. Разумеется, они существуют и вносят определенный вклад в особенности структуры электронных оболочек, оставшихся у нас вне поля зрения. Эти взаимодействия приводят в основном к следующему. Состояния любого атома характеризуются полным орбитальным и спиновым моментами, а также суммарным механическим моментом атома. При одной и той же электронной конфигурации может быть несколько состояний с различными значениями моментов $L$ и $S$. Они отличаются по энергии вследствие электрических взаимодействий в атоме.

Состояния при одних и тех же $L$ и $S$ имеют разную энергию вследствие релятивистских эффектов и магнитных взаимодействий (тонкая структура уровней).

**18.3. Рентгеновские спектры атомов.** Если оптические спектры атомов являются основным источником информации о внешних электронах, то характеристические рентгеновские спектры содержат информацию о внутренних электронах в атоме.

Рентгеновские спектры прежде всего удивительно однообразны. Спектры всех элементов состоят из сравнительно небольшого числа линий, одинаково расположенных относительно друг друга. Спектральные линии имеют одинаковую тонкую структуру. При переходе от одного элемента к другому линии смещаются по шкале частот. В 1913 г. Г. Мозли установил следующий закон для рентгеновских спектров:

$$\nu = \frac{Ry}{2\pi\hbar}\left[\frac{(Z-\sigma_n)^2}{n^2} - \frac{(Z-\sigma_m)^2}{m^2}\right], \qquad (18.8)$$

где $n$ и $m$ — целые числа, причем $m > n$; $\sigma_n$, $\sigma_m$ — постоянные для серий, которые следует определить при фиксированном $n$.

Серии носят названия: $K$-серия ($n=1$), $L$-серия ($n=2$), $M$-серия ($n=3$) и т. д. Характерно, что для самых легких элементов имеется только одна серия $K$; вместе с ростом $Z$ растет и число серий.

Особенности рентгеновских спектров, отраженные в формуле (18.8), являются одним из прямых экспериментальных подтверждений справедливости предположения о том, что каждый внутренний электрон находится в центрально-симметричном стационарном электрическом поле. Действительно, теория атома, базирующаяся на этом предположении, дает в первом приближении для уровней энергии электронов выражение

$$E_n = -\frac{1}{n^2} Ry\,(Z^*)^2,$$

где $Z^*$ — эффективный заряд ядра (в единицах, равных элементарному заряду). Если положить $Z^* = Z - \sigma_n$, то при переходах излучаемые частоты соответствуют эмпирической формуле Мозли (18.8).

Постоянная $\sigma_n$ учитывает экранировку ядра электронами, расположенными ближе к ядру, чем данный. Эта поправка зависит от главного квантового числа $n$, т. е. от номера слоя, в котором находится электрон.

(Поправка на экранирование $\sigma$ различна для состояний, определяемых разными квантовыми числами: $n$ и $l$. Последнее не учитывается формулой (18.8), как не учитываются и расщепление линий на мультиплеты за счет зависимости уровней энергии от орбитального квантового числа $l$ и их тонкая структура.)

Поскольку переходы происходят на внутренних уровнях, в нормальном состоянии атома заполненных электронами, то для излучения необходимо удаление электрона с одного из этих уровней. Увеличение числа серий с ростом $Z$ объясняется увеличением числа уровней, на которые возможны переходы, с ростом номера периода таблицы Менделеева. Значительная величина рентгеновских квантов обязана множителю $(Z^*)^2$, входящему в формулу (18.8).

**18.4. Стационарные состояния и уровни энергии многоэлектронных атомов.** Многоэлектронные атомы представляют собой систе-

мы электронов, взаимодействующих с ядром и друг с другом. Если внешнее переменное поле отсутствует, то для атома должны иметь место стационарные состояния, ибо гамильтониан замкнутой системы не содержит времени (см. § 9, п. 4). В нерелятивистской квантовой механике задача по отысканию функций состояния и значений энергии многоэлектронного атома в общем случае сводится к решению уравнения Шредингера для системы частиц, взаимодействующих между собой на расстоянии; поэтому следует учесть все попарные взаимодействия частиц. С решением подобной задачи в простейшем случае, для атома гелия с двумя электронами, мы познакомились ранее. Теперь произведем качественный анализ состояний других многоэлектронных атомов.

При самой общей постановке вопроса об атоме как замкнутой системе взаимодействующих частиц находятся сохраняющиеся величины, имеющие определенные значения и характеризующие стационарные состояния системы в целом. Прежде всего это энергия и момент импульса. При сохранении полной энергии системы энергия отдельных электронов не сохраняется. Не сохраняются ни по величине, ни по направлению орбитальные моменты электронов, не сохраняются по направлению их спиновые моменты. Что касается функции состояния, то она зависит от координат и спиновых переменных всех электронов, не распадаясь на отдельные множители. Стационарное состояние атома характеризуется уровнем энергии $E$ и полным механическим моментом $\vec{J}$. Уровень может быть обозначен через $E_j$, где $j$ — квантовое число полного механического момента системы. Энергия от направления момента не зависит, т. е. уровень $E_j$ вырожден с кратностью $2j+1$.

При написании гамильтониана для многоэлектронного атома следует учесть кулоновское взаимодействие электронов с ядром и друг с другом, взаимодействие электронов между собой за счет орбитальных магнитных моментов, за счет спиновых магнитных моментов, взаимодействие спиновых и орбитальных моментов друг с другом. (Кроме того, как показывает детальное изучение атома водорода в § 16, п. 4, имеют место магнитные взаимодействия электронов с ядром, также обладающим магнитным моментом, взаимодействия электронов с вакуумом как особым невозбужденным состоянием электромагнитного поля.)

Понятно, что уравнение с таким сложным гамильтонианом может быть решено только приближенными методами. При качественном анализе состояний мы будем учитывать взаимодействия последовательно, начиная с больших и переходя к меньшим. Поэтому слагаемые в гамильтониане, описывающие энергии взаимодействия частиц в системе, следует расположить в порядке убывания интенсивности соответствующих взаимодействий:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \Delta_i-\sum_i \frac{\varkappa Ze^2}{r_i}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}\frac{\varkappa e^2}{r_{ik}}+\hat{w}_{\text{о-с}}+\hat{w}_{\text{с-с}}+\hat{w}_{\text{о-о}}+\hat{w}.$$

На первое место ставятся электрические взаимодействия электронов с ядром, затем — электронов между собой. Далее идут магнит-

ные взаимодействия орбита — спин, спин — спин, орбита — орбита, величины которых близки друг к другу, но меньше электрических. (Другие малые взаимодействия, обозначенные оператором $w$, мы рассматривать не будем.)

На первом этапе анализа состояния и расчета уровня энергии атома рассматривается взаимодействие электронов с ядром, а взаимодействия электронов между собой не учитывается. Важно, что в этом приближении состояние электрона определяется четверкой квантовых чисел: $n_i$, $l_i$, $m_i$, $m_{si}$. Далее при учете следующих членов в гамильтониане это состояние используется как исходное. На его основе рассматриваются, например, слои и оболочки в теории периодической системы, строятся функции состояния атома гелия для следующих за нулевым приближений теории возмущений.

Однако при расчете уровня энергии считать все электроны движущимися в поле ядра с потенциалом $U = -\frac{\varkappa Z e^2}{r_i}$ было бы слишком грубым приближением (это видно из задачи об атоме гелия с двумя электронами, см. § 17, п. 3). Поэтому каждый электрон рассматривается находящимся в некотором эффективном центрально-симметричном поле, созданном ядром вместе со всеми остальными электронами. Примером такого поля служит поле ядра и электронов — остова атомов щелочных элементов (см. § 18, п. 1), потенциал которого выражается формулой (18.1). В других случаях эффективный потенциал можно выразить формулой $U = -\frac{\varkappa Z^* e^2}{r}$. Здесь при расчете потенциала учитывается не весь заряд ядра, так как оно экранируется электронным облаком других электронов, а некоторая его часть — эффективный заряд $Z^*$. Правомерность такого подхода подтверждается высокой точностью формулы Мозли (18.8) для рентгеновских спектров. В ней

$$Z^* = Z - \sigma_i(n)$$

эффективный заряд ядра меньше истинного на величину $\sigma_i(n)$, называемую константой экранирования. Для разных электронов в атоме она различна: растет с ростом квантового числа $n$.

Для различных электронов в одном и том же атоме эффективные поля неодинаковы. Эффективные потенциалы для разных электронов должны определяться совместно, так как каждый из них зависит от движения всех остальных электронов, а движение — от поля. По этой причине эффективное поле называют самосогласованным. Представление о методах его нахождения можно получить из § 8, п. 5. Сейчас же подчеркнем, что и в этом случае сохраняют смысл указанные выше квантовые числа отдельного электрона.

Итак, если эффективный центрально-симметричный потенциал $V(r_i)$ известен, то в приближении эффективного поля состояние атома определяется перечислением квантовых чисел $n_i$ и $l_i$ всех электронов, т. е. заданием электронной конфигурации атома. Соответственно можно записать функции состояния системы как надлежащим образом симметризованные линейные комбинации произведений одночастичных функций при исходных значениях $n_i$, $l_i$, $m_i$, $m_{si}$, а энер-

гию уровня — как сумму энергий электронов в эффективном поле. Понятно, что сохраняются энергии и моменты импульса отдельных электронов. Это *одночастичное приближение.*

В следующем приближении учитываются электрические взаимодействия между электронами в виде так называемого *остаточного взаимодействия.* Под потенциалом остаточного взаимодействия понимается часть кулоновского потенциала взаимодействия между электронами, не сводящаяся к потенциалу эффективного поля:

$$V_{i\,\text{ост}}=\sum_k \frac{\varkappa e^2}{r_{ik}} - V(r_i),\quad k\neq i.$$

С учетом остаточных взаимодействий о состоянии отдельного электрона в атоме говорить не приходится. Теперь в системе сохраняются и могут иметь определенные значения полная энергия и полные моменты импульса — орбитальный и спиновый.

На примере атома гелия мы видели, что благодаря взаимодействию электронов между собой уровень энергии зависит от орбитального квантового числа системы $l$ и от класса симметрии координатных функций, а последний — от полного спина системы $s$. (В рассматриваемом приближении спин в оператор гамильтона не входит.) И для других атомов стационарные состояния характеризуются определенными значениями: $E$, $\vec{L}$, $\vec{S}$. Поскольку уровень энергии не зависит от направлений векторов $\vec{L}$ и $\vec{S}$ в пространстве, то он вырожден с кратностью $(2l+1)(2s+1)$

Уровень энергии можно было бы обозначить через $E_{ls}$. Однако по историческим причинам используются специальные обозначения для стационарных состояний атома и соответствующих уровней энергии (они нами уже введены в § 17). По квантовому числу $l$ состояния обозначаются прописными латинскими буквами: $S$-, $P$-, $D$-, $F$-, $G$-, $H$-состояния или термы. Вверху слева от буквы ставится число $2s+1$, называемое мультиплетностью терма и определяемое спином системы: ${}^{2s+1}S$, ${}^{2s+1}P$ и т. д.

Последний этап анализа состояния многоэлектронного атома — учет магнитных взаимодействий между электронами. Если рассматривать магнитные взаимодействия как возмущения, то к уровням энергии $P$, $D$, $F$ и т. д., найденным в приближении остаточного взаимодействия, найдутся поправки, расщепляющие уровни на тесные подуровни. Поправки возникают за счет магнитного взаимодействия орбита — спин; полный магнитный момент орбитального движения электронов, объединенных в систему остаточным взаимодействием, взаимодействует с полным спиновым магнитным моментом этой системы, где спины объединены взаимодействием спин — спин.

Так как величина энергии взаимодействия магнитных моментов зависит от их ориентации, то при $l>s$ уровни $E_{ls}$ распадаются на $2s+1$ подуровней (число подуровней в этом случае равно мультиплетности). В случае $S$-термов распадения нет, а если $l<s$, то число подуровней $2l+1$ меньше мультиплетности.

Взаимодействия спин — спин и орбита — орбита не вызывают расщепления уровня $E_{ls}$, так как не зависят от взаимной ориентации $\vec{L}$ и $\vec{S}$. Они приводят лишь к небольшим сдвигам уровней.

Итак, магнитные взаимодействия орбита — спин снимают вырождение по различным взаимным ориентациям векторов $\vec{L}$ и $\vec{S}$. Теперь каждому значению энергии атома соответствует квантовое число полного момента импульса атома $j$. (Вырождение осталось только по его проекциям.) В записи терма внизу справа у буквы ставится число $j$. Каждому его значению соответствуют определенное состояние и энергетический подуровень. Полное обозначение стационарных состояний — атомных термов — в этом приближении таково: ${}^{2s+1}S_j$, ${}^{2s+1}P_j$, ${}^{2s+1}D_j$ и т. д. Так как термы при разных конфигурациях могут иметь одинаковые обозначения, но разные энергии, то для однозначного задания состояния атома следует задать его конфигурацию и терм. Например, конфигурация электронов атома гелия $(1s)^1(2s)^1$ дает синглетный терм парагелия ${}^1P_1$ и один триплетный ортогелия ${}^3S_1$ (при мультиплетности 3 для $S$-терма существует один уровень энергии). Для конфигурации $(1s)^1$ и $(2p)^1$ имеется синглетный терм парагелия ${}^1P_1$ и триплет ортогелия: ${}^3P_0$, ${}^3P_1$, ${}^3P_2$ — с тремя тесными подуровнями энергии.

Что касается количественных расчетов уровня $E_{ls}$ и соответствующих функций состояния, то они выполняются в рамках рассмотренной выше схемы различными приближенными методами. Так, теория возмущений была применена выше, к атому гелия. В следующем пункте рассмотрим метод самосогласованного поля.

Описанная схема расчета уровней энергии многоэлектронного атома применима при условии, что взаимодействия можно расположить в последовательности: действие на электроны эффективного потенциала (одночастичное приближение), остаточное взаимодействие, спин-орбитальное взаимодействие. У большинства атомов величина магнитного взаимодействия спин — спин и спин — орбита имеет один и тот же порядок и меньше остаточных. В таком случае рассмотренная схема применима и говорят об $L-S$-связи, для которой характерно сложение при расчете *отдельно орбитальных* и *отдельно спиновых* моментов. Исключения представляют некоторые тяжелые атомы с почти полностью заполненными оболочками: у них взаимодействия спин — спин много больше взаимодействий орбита — спин и больше остаточных. В таком случае правомерен другой порядок сложения моментов импульса и другой метод определения терма. Кроме того, нередки случаи, когда спин-орбитальные и остаточные взаимодействия близки по величине. Для изучения этих вопросов мы отсылаем читателя к специальной литературе (см [3], [7])

Пример 18.1. **Определение возможных состояний атома с учетом тождественности электронов.**

Если квантовые числа $n$ и $l$ у двух или более электронов в электронной конфигурации совпадают, то для определения возможных состояний необходимо учитывать запрет Паули. Пусть имеется конфигурация $(1s)^2$. В этом случае $m_1=0$ и $m_2=0$; поэтому возможны лишь состояния системы с различными значениями $m_s$, т. е.

спины противоположны. Возможно состояние $^1S_0$. Найденный результат соответствует отсутствию у атома гелия, а также у других атомов с двумя валентными электронами: Be, Mg, Ca — триплетного основного состояния.

Пример 18.2. **Анализ состояний атома углерода.**

Для атома с одной незаполненной верхней оболочкой справедливо правило: при заданной конфигурации наименьшему по энергии состоянию атома соответствует наибольшее возможное значение $s$. Если есть несколько состояний с одним и тем же значением $s$, то следует выбрать состояние с наименьшим $l$.

Для основного состояния $j=l+s$, если число электронов больше половины от максимального. Если оболочка заполнена менее чем наполовину, то $j=|l-s|$.

Используя это правило, найдем значения $l$, $s$ и $j$ для основного состояния атома углерода. Конфигурация его $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Заполненные слои и оболочки не рассматриваем, т. е. анализируем конфигурацию $2p$, $2p$. (Это значит, что $n_1=n_2=2$, $l_1=l_2=1$, и электроны должны отличаться либо проекциями спинов, либо проекциями орбитальных моментов.) Спин системы принимает значения $s=0,1$, орбитальный момент — $l=0, 1, 2$. Для низших энергий спин максимален, т. е. $s=1$, и спины электронов параллельны. Запрет Паули оставляет только состояния с различными $m_1$ и $m_2$. Возможны две комбинации: 0, 1 и 0, $-1$; они соответствуют полному орбитальному моменту $l=1$.

Итак, получен триплет $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$. Поскольку оболочка заполнена менее чем наполовину, то для основного состояния $j=0$. Основной терм $^3P_0$.

**18.5. Понятие о методе самосогласованного поля.** Познакомимся с приближенным методом решения квантово-механических задач, называемым методом самосогласованного поля, на примере атома гелия. Пусть волновые функции $\varphi_{n1}(\vec{r}_1)$ и $\varphi_{n2}(\vec{r}_2)$ описывают движение электронов в эффективных полях $U_1(\vec{r}_1)$ и $U_2(\vec{r}_2)$. Эти функции — решения уравнений Шредингера:

$$\begin{aligned}\Delta\varphi_{n1}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E_1-U_1(\vec{r}_1)]\varphi_{n1}=0,\\ \Delta\varphi_{n2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E_2-U_2(\vec{r}_2)]\varphi_{n2}=0.\end{aligned} \tag{18.9}$$

Потенциалы $U_1$ и $U_2$ описывают взаимодействие электронов с ядром и друг с другом. Поэтому можно предположить, что

$$\begin{aligned}U_1=-\frac{\varkappa Ze^2}{r_1}+\varkappa e^2\int\frac{|\varphi_{n2}|^2dV_2}{r_{12}},\\ U_2=-\frac{\varkappa Ze^2}{r_2}+\varkappa e^2\int\frac{|\varphi_{n1}|^2dV_1}{r_{12}}.\end{aligned} \tag{18.10}$$

Чтобы получить явные выражения для эффективных потенциалов, нужно знать $\varphi_{n1}$ и $\varphi_{n2}$. Они находятся из уравнений (18.9). Но эти уравнения нельзя решить, не зная потенциалов. Поэтому применяется итерационный процесс: задают $U_1$ и $U_2$ некоторыми пробными выражениями $\left(\text{например, } U=-\frac{\varkappa Ze^2}{r}\right)$, по ним находят функции $\varphi_{n1}$ и $\varphi_{n2}$ и подставляют в формулы (18.10). Далее процедура повторяется. После нескольких циклов вид функций $\varphi_{n1}$ и $\varphi_{n2}$ стабилизируется и оказывается согласованным с видом полей $U_1$ и $U_2$. Отсюда термин *самосогласование*.

Заметим, что обычно зависимость $U_1(\vec{r}_1)$ и $U_2(\vec{r}_2)$ усредняют по всем направлениям радиус-вектора, чтобы на каждом шаге расчета иметь центрально-симметричное поле. Поэтому первоначально введенные квантовые числа $n_1$ и $n_2$ сохраняют

свой смысл. Функция состояния для многоэлектронного атома есть произведение одночастичных волновых функций или их линейная комбинация. Таким образом, достаточно сложная система взаимодействующих частиц сводится к системе невзаимодействующих частиц.

Приведенное выше описание метода самосогласованного поля опирается на идеи, впервые выдвинутые Д. Хартри. Дальнейшее его развитие связано с работами советского физика В. А. Фока. Он показал, что соотношения (18.9) и (18.10) можно получить исходя из вариационного принципа:

$$\delta \int \psi^* \widehat{H} \psi dx = 0, \tag{18.11}$$

где $\widehat{H}$ и $\psi$ — гамильтониан и волновая функция атома; $x$ — совокупность координат электронов.

Применение вариационного принципа позволяет учесть обменное взаимодействие. При использовании вариационного соотношения (18.11) волновая функция $\psi$ строится из одночастичных волновых функций $\varphi_i(\vec{r}_i)$, вид которых выбирается в соответствии с представлениями об эффективных полях внутри атома. Функция состояния $\psi$ строится так, чтобы она отвечала определенному набору характеристик атома (энергия, суммарный орбитальный момент и т. д.), а также имела заданную симметрию относительно перестановок координат частиц. Обычно функции $\varphi_i$ и $\psi$ содержат свободные параметры, по которым и производится варьирование.

Мы проследим за количественным расчетом по методу самосогласованного поля в простейшем случае основного состояния $(1s)^2$ атома гелия. Функция состояния без учета взаимодействия электронов между собой найдена ранее:

$$\psi = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 e^{-\frac{Z}{a}(r_1+r_2)}. \tag{18.12}$$

Подставим ее вместе с гамильтонианом (17.1) в интеграл формулы (18.11), определяя тем самым энергию состояния. Для вычислений интеграл удобно записать в виде трех слагаемых:

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\iint \psi\,(\Delta_1+\Delta_2)\,\psi dV_1 dV_2,$$

$$E_2 = -\varkappa Z e^2 \iint \psi^2 \left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right) dV_1 dV_2,$$

$$E_3 = \varkappa e^2 \iint \psi^2 \frac{1}{r_{1,2}} dV_1 dV_2, \quad \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\varkappa a e^2}{2}.$$

Первые два интеграла берутся легко; значение третьего интеграла встречалось ранее, в § 17, п. 3. В итоге имеем

$$E = Z^2 \frac{\varkappa e^2}{a} - 4Z \frac{\varkappa e^2}{a} + \frac{5}{8} Z \frac{\varkappa e^2}{a}. \tag{18.13}$$

Энергия состояния может рассматриваться как функция параметра $Z$, а при варьировании в соответствии с (18.11) $Z$ следует считать переменной величиной, подлежащей определению. Введем

поэтому эффективное число $Z^*$, для которого выполняется условие экстремума функции (18.13):

$$2Z^* \frac{\varkappa e^2}{a} - 4 \frac{\varkappa e^2}{a} + \frac{5}{8} \frac{\varkappa e^2}{a} = 0.$$

Отсюда следует

$$Z^* = \frac{27}{16}.$$

Осталось записать «согласованные» значения функции состояния и уровня энергии, опираясь на исходное приближение и уточняя в нем лишь параметр $Z$:

$$\psi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{27}{16a}\right)^3 e^{-\frac{27}{16a}(r_1 + r_2)},$$

$$E = -\frac{\varkappa e^2}{a} \left(\frac{27}{16}\right)^2.$$

(Можно произвести сравнение с результатом в первом приближении теории возмущений. Там было $|E| = 2{,}75 \frac{\varkappa e^2}{a}$; теперь $|E| = 2{,}85 \frac{\varkappa e^2}{a}$; экспериментальное значение: $|E| = 2{,}90 \frac{\varkappa e^2}{a}$.)

Для возбужденных состояний атома гелия, а также для других более сложных атомов вычисления значительно сложнее, но общие направления их те же: в интеграл подставляют функцию, которую хотят улучшить, варьируют интеграл, уточняют функцию, снова подставляют ее в интеграл и т. д., пока результаты не станут повторяться, что свидетельствует о достижении предельно возможной точности. В рассмотренном нами примере процедура заканчивается на первом этапе — найденные значения оказываются лучшими из тех, какие можно получить по данному методу.

## § 19. ПОНЯТИЕ О ПРИРОДЕ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ

**19.1. Расчет энергии связи молекулы водорода по методу Гайтлера — Лоидона.** Для исследования молекулы водорода средствами квантовой механики требуется решить уравнение Шредингера с оператором Гамильтона:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - \frac{\varkappa e^2}{r_{1b}} - \frac{\varkappa e^2}{r_{2c}} - \frac{\varkappa e^2}{r_{1c}} - \frac{\varkappa e^2}{r_{2b}} + \frac{\varkappa e^2}{r_{1,2}} + \frac{\varkappa e^2}{R} \qquad (19.1)$$

Обозначения операторов расстояний ясны из схемы на рисунке 19.1. Ядра атомов считаются неподвижными. Магнитными взаимодействиями пренебрегаем. Для решения задачи применим теорию возмущений в варианте, предложенном В. Гайтлером и Г. Лондоном в 1927 г.

В качестве невозмущенной системы возьмем два невзаимодействующих атома водорода, находящихся на расстоянии $R$ друг от друга. Ясно, что взаимодействие между электронами и взаимодействие между ядрами относится к возмущению, а поправка к энергии, даваемая теорией возмущений, есть энергия связи атомов в молекуле. Расчет этой поправки и даст ответ на поставленную задачу. Предварительно полезно заметить, что для устойчивого состояния системы энергия связи должна быть отрицательной (см. ч. I, § 5).

Запишем оператор Гамильтона для невозмущенной системы:

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{ke^2}{r_{1b}} - \frac{ke^2}{r_{2c}}. \qquad (19.2)$$

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (19.2) допускает в нулевом приближении точные решения в виде линейных комбинаций произведений волновых функций $\varphi_b$ и $\varphi_c$.

Функция $\varphi_b$ описывает состояние одного из электронов, когда он находится в первом атоме; точно так же $\varphi_c$ — функция состояния для электрона, находящегося во втором атоме. Спектр квантовых состояний невзаимодействующих электронов и вид соответствующих одночастичных волновых функций известны, так как задача об атоме водорода решена ранее.

Если оба электрона находятся в состоянии $1s$, то имеем основное состояние молекулы водорода, которое и исследуется далее. Запишем одночастичные волновые функции состояния $1s$ для обоих электронов. Пользуясь формулами (10.11), (11.11) и (11.21) имеем

$$\varphi_b(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{1b}}{a}}, \quad \varphi_c(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{1c}}{a}},$$

$$\varphi_b(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{2b}}{a}}, \quad \varphi_c(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{2c}}{a}}$$

(здесь $a$ — боровский радиус).

Из этих координатных функций нужно построить симметричную функцию нулевого приближения системы двух электронов при антипараллельных спинах и антисимметричную — при параллельных спинах (см. § 14). Необходимые волновые функции нулевого приближения имеют вид симметризованных одночастичных произведений:

$$\psi_{(\pm)} = N_{(\pm)}[\varphi_b(1)\,\varphi_c(2) \pm \varphi_b(2)\,\varphi_c(1)], \qquad (19.3)$$

где $N_{(\pm)}$ — нормировочный множитель.

Выбор знака в формуле (19.3) зависит от полного спина молекулы водорода. Если электроны имеют одинаково ориентированные спины, то $s=1$, и следует взять знак «—». Если спины направлены противоположно друг другу, то $S=0$, и ставится знак «+» (см. § 14).

Энергия молекулы в нулевом приближении равна сумме энергий изолированных атомов, находящихся в основном состоянии: $E^{(0)} = -27{,}2$ эВ. Уровень энергии $E^{(0)}$ двукратно вырожден.

Прежде чем переходить от нулевого к первому приближению, нужно нормировать функции (19.3). При вычислениях следует учитывать, что функции $\varphi_b$ и $\varphi_c$ относятся к разным атомам и в них входят расстояния, отсчитываемые от разных центров — точек $b$ и $c$. Пусть $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ — радиус-векторы точек пространства в одной системе координат, начало которой связано с ядром $b$:

$$\int \psi^2_{(\pm)} dV_1 dV_2 = N^2_{(\pm)} \Big[ \int \varphi^2_b(1)\, \varphi^2_c(2)\, dV_1 dV_2 + \\ + \int \varphi^2_b(2)\, \varphi^2_c(1)\, dV_1 dV_2 \pm 2 \int \varphi_b(1)\, \varphi_c(2)\, \varphi_b(2)\, \varphi_c(1)\, dV_1 dV_2 \Big].$$

(Для краткости координаты $r_1$ и $r_2$ указаны только цифрами.) Одночастичные функции $\varphi_b$ и $\varphi_c$ нормированы, так что

$$\int \varphi^2_b(1)\, dV_1 = 1 \text{ и т. д.}$$

Замечая, что при указанном выборе начала системы координат $\vec{r}_1 = \vec{r}_{1b}$, $\vec{r}_2 = \vec{R} + \vec{r}_{2c}$, получаем

$$\int \psi^2_{(\pm)}\, dV_1 dV_2 = 2N^2_{(\pm)} [1 \pm \Sigma^2(R)], \tag{19.4}$$

где

$$\Sigma(R) = \int \varphi_b(1)\, \varphi_c(1)\, dV_1 = \int \varphi_b(2)\, \varphi_c(2)\, dV_2$$

называется интегралом перекрывания волновых функций. Нормируя волновую функцию (19 3) на единицу, имеем

$$N^2_{(\pm)} = \frac{1}{2(1 \pm \Sigma^2)}.$$

(Тот же результат получится, если выбрать начало координат в точке $c$.)

Для нахождения энергии основного состояния молекулы водорода в первом приближении теории возмущений применим формулу

$$E^{(1)} = \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 dx, \tag{19.5}$$

где $\hat{H}$ — полный гамильтониан системы, а $\psi_0$ — волновые функции нулевого приближения.

Если из $E^{(1)}$ можно выделить $E^{(0)}$, то искомая поправка — энергия связи молекулы: $\Delta E^{(1)} = E^{(1)} - E^{(0)}$ — в полном соответствии с формулой теории возмущений (16.8).

Итак, подставляя функции (19.3) в формулу (19.5), получаем

$$E^{(1)}_{(\pm)} = \int \psi^*_{(\pm)} \hat{H} \psi_{(\pm)}\, dV_1 dV_2. \tag{19.6}$$

Напомним, что волновые функции одноэлектронных состояний $\varphi_b(1)$, $\varphi_c(2)$ и т. д., являются собственными функциями операторов Гамильтона для изолированных атомов. Например,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + \frac{\varkappa e^2}{r_{1b}} \right) \varphi_b(1) = E_{1s} \varphi_b(1),$$

где $E_{1s}$ — энергия атома водорода в состоянии $1s$. Используя это свойство, можно преобразовать выражение (19.6) к виду

$$E^{(1)}_{(\pm)}=\frac{Q\pm A}{1\pm\Sigma^2}+E_{1s}+E_{1s}, \qquad (19.7)$$

где

$$Q(R)=\frac{\varkappa e^2}{2}\left\{\frac{2}{R}+\int\varphi_b^2(1)\varphi_c^2(2)\frac{dV_1dV_2}{r_{1,2}}+\int\varphi_b^2(2)\varphi_c^2(1)\frac{dV_1dV_2}{r_{1,2}}-\right.$$

$$\left.-\int\left(\frac{1}{r_{2b}}+\frac{1}{r_{1c}}\right)\varphi_b^2(1)\varphi_c^2(2)dV_1dV_2-\int\left(\frac{1}{r_{1b}}+\frac{1}{r_{2c}}\right)\varphi_b^2(2)\varphi_c^2(1)dV_1dV_2\right\},$$

$$A(R)=\frac{\varkappa e^2}{2}\left\{\int\varphi_b(1)\varphi_b(2)\varphi_c(1)\varphi_c(2)\cdot\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{1,2}}-\frac{1}{r_{2b}}-\frac{1}{r_{1c}}\right)dV_1dV_2+\right.$$

$$\left.+\int\varphi_b(1)\varphi_b(2)\varphi_c(1)\varphi_c(2)\cdot\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{1,2}}-\frac{1}{r_{1b}}-\frac{1}{r_{2c}}\right)dV_1dV_2\right\}. \qquad (19.8)$$

В формуле для $Q$ второе и третье слагаемые равны между собой. То же самое можно сказать о четвертом и пятом слагаемых. В конечном итоге

$$Q(R)=\varkappa e^2\left\{\frac{1}{R}+\int\frac{\varphi_b^2(1)\varphi_c^2(2)}{r_{1,2}}dV_1dV_2-\int\frac{\varphi_b^2(1)}{r_{1c}}dV_1-\int\frac{\varphi_c^2(2)}{r_{2b}}dV_2\right\}$$

выражает энергию кулоновского взаимодействия всех частиц, входящих в молекулу. При этом заряд каждого из электронов можно для наглядности считать распределенным в пространстве вокруг ядер атомов с плотностью $\rho_b(1)=-e\varphi_b^2(1)$ или $\rho_c(2)=-e\varphi_c^2(2)$.

Энергию, определяемую интегралом $A(R)$, называют обменной энергией (см. § 17). Она составляет часть энергии электрического взаимодействия между электронами и ядрами, обусловленную неразличимостью электронов.

Теперь мы располагаем всем необходимым для определения энергии связи молекулы водорода. С помощью (19.7) находим

$$\Delta E^{(1)}_{(\pm)}=\frac{Q(R)\pm A(R)}{1\pm\Sigma^2(R)}.$$

Энергия связи зависит от расстояния между ядрами. Вычисления показывают, что при параллельных спинах кривая $\Delta E^{(1)}_{-}$ монотонно убывает с ростом $R$ (рис. 19.2). Так как она не имеет минимума, то связанное состояние молекулы при единичном полном спине не образуется. Напротив, при антипараллельных спинах функция $\Delta E^{(1)}_{+}$ имеет минимум на расстоянии $R_0=0{,}080$ нм (экспериментальное значение равновесного расстояния 0,074 нм). Поэтому при нулевом полном спине системы возможно образование молекулы из атомов водорода.

Различия во взаимодействии атомов в состояниях с полным спином 1 и 0

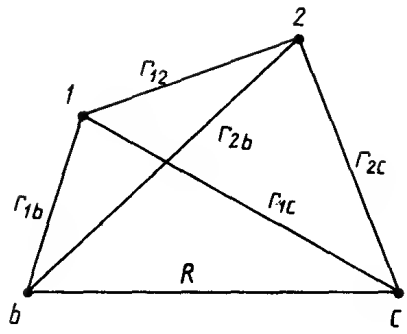



Рис. 19.1.

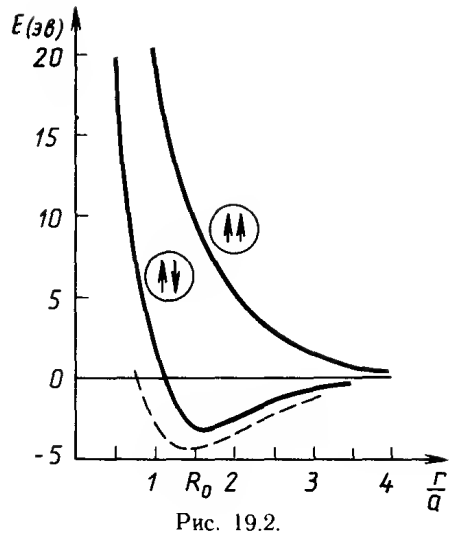



Рис. 19.2.

легко понять, если исследовать поведение функций состояния молекулы (19.3). Функция $\psi_{(-)}$ обращается в нуль на плоскости, перпендикулярной линии, соединяющей ядра, и проходящей посредине между ними: вероятность нахождения электронов здесь равна нулю. Функция $\psi_{(+)}$ в точках этой плоскости отлична от нуля, отличная от нуля и вероятность обнаружения электронов в пространстве между ядрами. Это приводит к преобладанию сил притяжения по отношению к силам отталкивания при $R > R_0$. (Если $R < R_0$, то атомы отталкивают друг друга.)

Величина энергии связи, рассчитанная в первом приближении теории возмущений, довольно плохо согласуется с экспериментальным ее значением, то же относится и к равновесному расстоянию (см. рис. 19.2). Однако качественное объяснение образования связи достигнуто. Выяснено, что энергия связи существенно зависит от величины обменного интеграла $A(R)$. Поэтому образование химической связи невозможно понять без учета обменного взаимодействия и зависимости его от взаимной ориентации спинов. (Количественные результаты могут быть улучшены при расчетах с помощью других приближенных методов.)

**19.2. Адиабатическое приближение.** В общем случае оператор Гамильтона для молекулы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T}_R + \hat{T}_r + \hat{U}(r, R), \tag{19.9}$$

где

$$\hat{T}_R = \sum_i \left( -\frac{\hbar^2}{2M_i} \right) \Delta_R$$

— оператор кинетической энергии движения ядер, а

$$\hat{T}_r = \sum_k \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta_k$$

— оператор кинетической энергии движения электронов; $U(r, R)$ — потенциальная энергия взаимодействия всех частиц. Буква $R$ обозначает операторы координат ядер, а $r$ — совокупность операторов координат электронов.

Ядра в тысячи или даже десятки и сотни тысяч раз тяжелее электронов. В то же время для всех частиц одинакова средняя интенсивность действующих на них сил. Это обусловливает относительную медленность движения ядер и большую подвижность

легких частиц. Все это приводит к выводу, что электроны в своем движении успевают перестраиваться в такт движению ядер. Поэтому состояние электронной подсистемы должно зависеть от мгновенного расположения ядер. Напротив, ядра реагируют только на усредненное воздействие электронов. Это объясняется большой массой ядер, так что даже при очень малом перемещении ядер электроны успевают сделать большое число оборотов вокруг них.

Высказанные физические соображения лежат в основе подхода, при котором раздельно изучаются легкая и тяжелая подсистемы в молекуле. Сначала рассматривается движение электронов при закрепленных ядрах. Получив данные при всех возможных значениях координат ядер, рассчитывают движение самих ядер: сведения об электронах позволяют вычислить силы, действующие на ядра как функции переменных $R$.

С математической стороны при таком способе исследования молекул учитывается, что оператор $\widehat{T}_R$ в гамильтониане (19.9) представляет собой малое слагаемое по сравнению с другими членами и в первом приближении может быть опущен. Это соответствует замене оператора $\widehat{H}$ оператором $\widehat{H}_0$:

$$\widehat{H}_0 = \widehat{T}_r + \widehat{U}(r, R).$$

Собственные функции и собственные значения оператора $\widehat{H}_0$ находятся из уравнения

$$\widehat{H}_0 \varphi_n(r, R) = E_n(R)\, \varphi_n(r, R). \tag{19.10}$$

Аргументами функций $\varphi_n$ являются координаты электронов $r$. Координаты ядер $R$ суть параметры, от которых зависят и $\varphi_n$, и энергия молекулы $E_n$, найденная без учета движения ядер. Для устойчивых состояний кривая $E_n(R)$ должна иметь точку минимума.

Функции состояния $\varphi_n$ описывают движение легких частиц при закрепленных ядрах. На следующем этапе исследуется тяжелая подсистема.

Ищем волновую функцию молекулы в виде разложения

$$\psi = \sum_n f_n(R)\, \varphi_n(r, R).$$

Сомножители $\varphi_n$ — решения уравнения (19.10). Коэффициенты $f_n(R)$ описывают перемещение ядер. Подставим ряд $\psi$ в полное уравнение Шредингера для молекулы:

$$\widehat{H} \sum_n f_n \varphi_n = E \sum_n f_n \varphi_n.$$

Исходя из этого соотношения можно показать, что функции $f_n(R)$ удовлетворяют системе уравнений

$$(\widehat{T}_R + E_n(R) - E) f_n(R) = \sum_k \widehat{\Lambda}_k f_k.$$

Операторы $\widehat{\Lambda}_k$ мы не будем выписывать в явном виде. Их обычно считают малыми членами и отбрасывают, что соответствует изучению движения ядер на основе приближенных уравнений

$$(\widehat{T}_R + E_n(R) - E) f_n(R) = 0.$$

По виду это уравнения Шредингера, в которых роль потенциальной энергии играет величина $E_n(R)$, найденная из уравнения (19.10). Опущенные члены с операторами $\widehat{\Lambda}_k$ учитывали возможность перехода электронной подсистемы из одного квантового состояния в другое, вызванного движением ядер. В рассматриваемом приближении переходов не происходит и состояние системы электронов можно считать фиксированным. Итак, $E$ есть энергия молекулы, взятая уже с учетом движения ядер.

Данное приближение в теории молекул называется *адиабатическим*. Для него характерно раздельное изучение движения электронов и ядер. Обе компоненты — электронная и ядерная — описываются разными множителями в полной волновой функции молекулы:

$$\psi_n(r, R) = f_n(R)\, \varphi_n(r, R).$$

Квантовое состояние электронной оболочки молекулы определяется сразу при всех значениях параметра $R$ (см. задачу о молекуле водорода).

Движение ядер рассматривается при неизменном электронном состоянии молекулы. Конфигурация электронного облака позволяет рассчитывать силы, действующие на ядра. В частности, они могут быть найдены как градиенты от потенциальной энергии $E_n(R)$ (дифференцировать нужно по координатам ядер). Заметим, что энергия $E_n(R)$ не зависит от координат электронов и представляет собой характеристику, усредненную по движению легких частиц. (Как нетрудно видеть, $E_n(R)=\int \varphi_n^* \hat{H}_0 \varphi_n \, dr$.)

Сдвиг ядер от точки минимума $R_0$ приводит к возрастанию функции $E_n(R)$, поэтому относительное движение ядер может быть только колебаниями около положения равновесия $R_0$.

Помимо внутреннего колебательного движения молекула может совершать вращательное движение вокруг центра масс как твердое тело. (Поступательное движение вместе с центром масс из рассмотрения исключается как не представляющее интереса.)

Прн небольшой амплитуде колебаний ядер изменения электронного состояния молекулы не происходит. Поэтому и можно раздельно изучать движение электронов и ядер. В общем случае движение ядер вызывает переходы из одного электрониого состояния в другое, и оба вида движения нельзя рассматривать по отдельности. Но и в этом случае адиабатическое приближение позволяет понять процессы, происходящие в молекуле.

**19.3. Наглядная интерпретация сил химической связи между атомами.** Качественные особенности взаимодействия атомов в молекулах легко объяснить на основе простых модельных представлений, базирующихся на результатах изучения молекулы водорода.

Химическая связь возникает в результате обобществления электронов, принадлежащих двум разным атомам. Атомы вступают в соединение, если энергия объединенной системы ниже энергии изолированных атомов. Уменьшение энергии происходит вследствие перераспределения электрического заряда в электронной оболочке молекулы. Плотность электронного облака увеличивается в пространстве между атомами. Это происходит за счет корреляции со спинами движения электронов, за счет обменного взаимодействия. По своей природе химическая связь сводится к электрическому взаимодействию между всеми электронами и ядрами в системе. Если известна плотность распределения заряда в электронной оболочке молекул, то энергия взаимодействия может быть оценена по классическим формулам. Однако конфигурацию электронного облака нельзя установить средствами классической физики. Она определяется из решения уравнения Шредингера для всей системы с учетом спина, класса симметрии волновой функции и т. д.

При ковалентной связи отрицательный заряд электронного облака в значительной своей части сосредоточивается в области между ядрами. При ионной связи вероятность обнаружения электрона возле одного атома оказывается значительно больше, чем около другого. Об этом говорят как о переходе электрона из одного атома в другой. (В системе двух атомов переход становится энергетически выгодным, если энергия ионизации первого атома меньшей энергии, выделяющейся при подсоединении электрона ко второму атому.)

Благодаря обменному характеру взаимодействия интенсивность связи существенно зависит от перекрывания волновых функций. По-

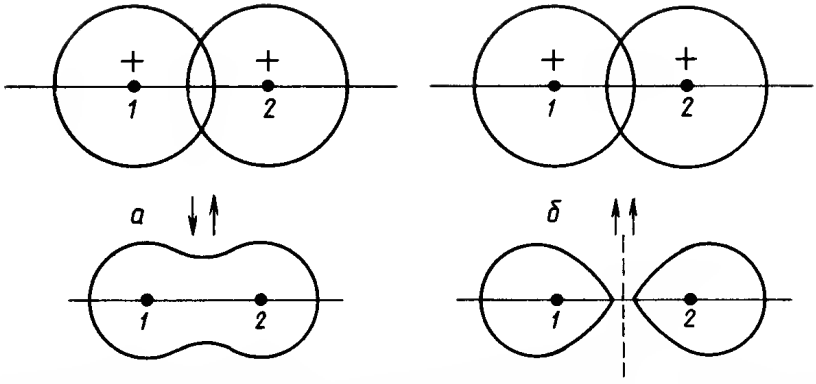



Рис. 19.3. Форма электронного облака в молекуле водорода: *а* — при симметричной координатной волновой функции; *б* — при антисимметричной. (В первом случае заметно сгущение облака в пространстве между ядрами.)

этому химические силы быстро убывают с увеличением расстояния между атомами.

Объединение атомов в молекулу через ковалентную связь возможно лишь в том случае, если электрон одного атома вступает в «обмен» с электроном другого атома, имеющим противоположное направление спина. Эта пара электронов, как видно из примера молекулы водорода, описывается симметричной координатной функцией, обеспечивающей возникновение притяжения между атомами (рис. 19.3).

Силы химической связи обладают свойством насыщения: атом может присоединять ограниченное число других атомов. Так получается потому, что число электронов во внешних слоях атомов ограничено, и часть из них связана друг с другом; пары электронов находятся в одном и том же квантовом состоянии и имеют противоположные ориентации спинов. Такие спаренные электроны не образуют химических связей. Последние возникают только благодаря наличию во внешней оболочке неспаренных электронов. Каждый атом может образовывать с другими атомами столько ковалентных связей, сколько электронов со свободной ориентацией спина содержится в верхней его оболочке. Отсюда следует, например, одновалентность щелочных атомов и инертность атомов восьмой группы с полностью заполненной наружной оболочкой

Заполненные слои и оболочки всегда отталкиваются. Это утверждение имеет большое значение для понимания свойств ионной связи. После перехода электрона от одного атома к другому образуются два иона, которые притягиваются друг к другу за счет действия кулоновской силы. Но для того чтобы вся система находилась в равновесии, на малых расстояниях притяжение должно смениться отталкиванием. Так происходит, если атомы сблизятся настолько, что возникает взаимодействие между внутренними замкнутыми оболочками.

Квантовая механика оправдывает принятое в химии изображение молекул как совокупности атомов, соединенных локализованными в пространстве валентными связями. Локализация связей происходит вследствие уплотнения электронного облака по определенным

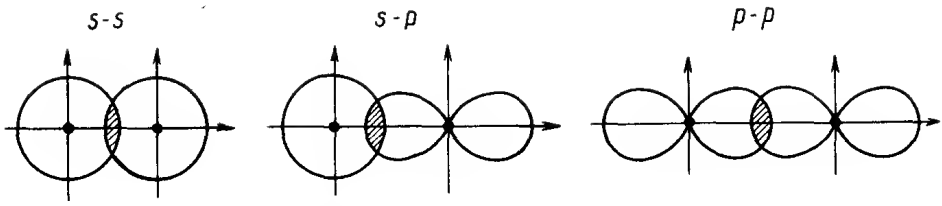



Рис 19 4 Перекрывание электронных облаков при образовании химической связи

направлениям в интервалах между атомами. Что касается значения самой валентности, то оно зависит от условий образования молекулы. Так, углерод двух- и четырехвалентен. Его электронная конфигурация в основном состоянии $(2s)^2\,(2p)^2$. Электроны в состоянии $2s$ спарены, $p$-электроны свободны Поэтому углерод способен образовать две связи с другими атомами. Однако часто при образовании молекулы энергетически выгодно возбуждение углерода до (близкого к основному) состояния $(2s)^1\,(2p)^3$. Тогда углеродный атом способен к образованию уже четырех связеи.

Электронное облако для электронов, находящихся в $p$-состояниях, вытянуто вдоль одной из осей Это фактически и обусловливает направленные в пространстве ковалентные связи, так как подсоединение других атомов к данному идет по направлениям наибольшего перекрывания волновых функций в валентной паре из «своего» и «чужого» электронов. Однако на деле вопрос о геометрической структуре молекулы оказывается более сложным, так как для расчета связей и углов между связями нужно знать конфигурацию электронных облаков взаимодействующих атомов в целом с учетом всех электронов, участвующих в образовании молекулы (рис. 19.4 и 19.5).

Между некоторыми атомами связь осуществляется не одной, а двумя или тремя парами электронов. Это двойные или тройные валентные связи (рис. 19.6).

Изложенные сведения о химических связях не претендуют на полноту и строгость. Они имеют приближенный качественный характер и не охватывают все многообразие химических явлений и методов изучения молекул. Тем не менее эти представления получили широкое распространение вследствие своей простоты и наглядности.

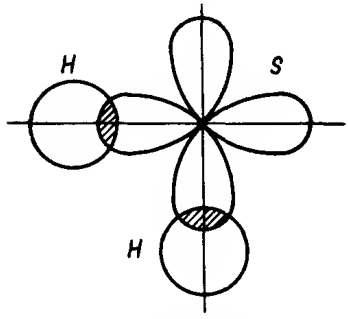



Рис. 19.5. Форма электронных облаков в молекуле $H_2S$ (видна направленность связей).

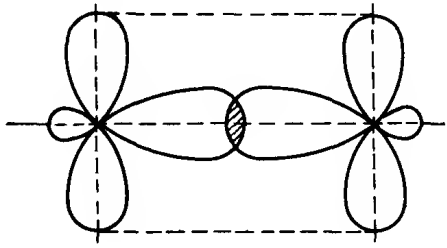


Рис. 19.6. Двойная химическая связь между атомами.

**19.4. Силы Ван-дер-Ваальса.** Напомним, что химические силы, благодаря которым возникает ковалентная связь между атомами, обусловлены обменными эффектами при движении электронов. Для их появления необходимо перекрывание волновых функций, что возможно только в небольшой области пространства. Поэтому химические силы очень быстро (экспоненциально) убывают при раздвижении атомов.

Опыт показывает, что между нейтральными атомами и молекулами, находящимися друг от друга на таких расстояниях, при которых химические силы становятся уже пренебрежимо малыми, обнаруживаются силы иной природы. Эти силы получили название сил Ван-дер-Ваальса. (Они, в частности, обусловливают отклонение свойств реального газа от идеального.)

Экспериментальное и теоретическое изучение свойств газов привело к установлению формулы для потенциала сил Ван-дер-Ваальса:

$$U(R) = -\frac{A}{R^6}, \tag{19.11}$$

где константа $A$ зависит от сорта взаимодействующих частиц; $U(R)$ — это энергия взаимодействия между двумя молекулами. Энергия взаимодействия всех молекул газа сводится к сумме энергий взаимодействия всех возможных пар этих частиц. Рассматриваемые силы универсальны: формула (19.11) справедлива для любых атомов и молекул.

Силы Ван-дер-Ваальса обеспечивают взаимодействие атомов инертных газов, их переход в жидкое и твердое состояние. Они ответственны за физическую адсорбцию молекул на поверхности твердых тел и ряд других явлений. Так, например, благодаря силам Ван-дер-Ваальса получается сцепление двух макроскопических кусков вещества при их сближении на малые расстояния при гладких контактирующих поверхностях (опыты со свинцовыми цилиндрами, прилипание стеклянной пластинки к поверхности воды и т. д.).

Для изучения природы сил Ван-дер-Ваальса рассмотрим взаимодействие двух атомов водорода (обобщение результатов на многоэлектронные атомы и молекулы не представляет больших затруднений). В адиабатическом приближении оператор Гамильтона данной системы можно записать в виде

$$\widehat{H} = \widehat{H}_b(r_1) + \widehat{H}_c(r_2) + \widehat{V}(r_1, r_2, R),$$

где $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ — операторы радиус-векторов электронов относительно центров соответствующих атомов (см. рис. 19.1); $R$ — оператор расстояния между ядрами; $\widehat{H}_b$ и $\widehat{H}_c$ — операторы Гамильтона для отдельных атомов. Величина $R$ предполагается настолько большой, что каждый из электронов считается локализованным в одном из атомов.

При $r_1 \ll R$ и $r_2 \ll R$ оператор взаимодействия между атомами запишем, опираясь на формулу для энергии взаимодействия двух

классических систем электрических зарядов в дипольном приближении (см. ч. III, § 6, п. 7):

$$\hat{V}(\vec{r}_1,\ \vec{r}_2,\ R)=\frac{\varkappa e^2}{R^3}\left(\vec{r}_1\vec{r}_2-\frac{3(\vec{r}_1\vec{R})(\vec{r}_2\vec{R})}{R^2}\right)=\frac{\varkappa e^2}{R^3}\hat{w}(\vec{r}_1\vec{r}_2). \quad (19.12)$$

(При переходе к многоэлектронным системам нужно заменить в в формуле (19.12) $\vec{r}_1$ на $\sum\limits_i \vec{r}_i$ и $\vec{r}_2$ на $\sum\limits_k \vec{r}_k$.)

Если направить ось $Oz$ по вектору $\vec{R}$ и произвести вычисления в (19.12), то получим

$$\hat{V}=\frac{\varkappa e^2\hat{w}}{R^3}, \qquad \hat{w}=(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2).$$

Для расчета энергии взаимодействия применим теорию возмущений. Невозмущенная система — это два изолированных атома с оператором Гамильтона:

$$\hat{H}_0=\hat{H}_b(\vec{r}_1)+\hat{H}_c(\vec{r}_2).$$

Волновая функция нулевого приближения представляет собой произведение

$$\psi_0(\vec{r}_1,\ \vec{r}_2)=\psi_{m_b}(\vec{r}_1)\,\psi_{m_c}(\vec{r}_2),$$

где через $m_b$ и $m_c$ обозначены совокупности главного и орбитального квантовых чисел, определяющие состояние электронов в атомах $b$ и $c$ в нулевом приближении.

Так как атомы находятся далеко друг от друга, то переходы электронов из атома в атом не осуществляются. Поэтому не нужно вводить симметричные и антисимметричные функции состояния. Обменное взаимодействие отсутствует.

Естественно рассчитывать силы Ван-дер-Ваальса для основного состояния системы — $1s$, $1s$. Энергия состояния в нулевом приближении равна сумме энергий изолированных атомов, а это значит, что поправка к энергии, даваемая теорией возмущений, равна энергии связи системы, т. е. энергии, обусловленной силами Ван-дер-Ваальса.

В первом приближении

$$\Delta E^{(1)}_{1s1s}=\frac{\varkappa e^2}{R^3}\int\psi^2_{1s}(\vec{r}_1)\psi^2_{1s}(\vec{r}_2)\,\hat{w}\,dV_1dV_2.$$

Для $1s$-состояния интегралы типа

$$\int x\psi^2_{1s}dV, \quad \int y\psi^2_{1s}dV, \quad \int z\psi^2_{1s}dV$$

равны нулю вследствие сферической симметрии электронного облака Об этом говорят как об отсутствии дипольного момента в основном состоянии. Отсюда следует $\Delta E^{(1)}_{1s\,1s}=0$.

Во втором приближении (см. § 16)

$$\Delta E^{(2)}_{(1s\ 1s)}=\frac{\varkappa^2e^4}{R^6}\sum_{m_b,\ m_c}\frac{|\hat{w}_{m_bm_c;\ 1s1s}|^2}{E^{(0)}_{1s\,1s}-E^{(0)}_{m_bm_c}}=-\frac{A}{R^6}, \qquad (19.13)$$

где сумма берется по всем возбужденным состояниям атомов. Так как поправка вычисляется к основному уровню, то она отрицательна; поэтому энергия взаимодействия отрицательна, что соответствует притяжению.

Итак, энергия связи определена как функция параметра $R$-расстояния между ядрами. Она играет роль потенциальной энергии для силы Ван-дер-Ваальса, действующей между атомами, и совпадает с видом, указанным в формуле (19.11).

Сила, действующая на ядра, находится как градиент потенциальной энергии. Она обратно пропорциональна седьмой степени расстояния между атомами. Силы Ван-дер-Ваальса имеют, как показали наши рассуждения, специфически квантовый характер.

Более сложным оказывается взаимодействие молекул, обладающих некоторым, отличным от нуля дипольным моментом. Помимо описанного выше *дисперсионного* взаимодействия между полярными молекулами возможно еще *ориентационное* и *индукционное* взаимодействия, также дающие свой вклад в энергию (19.11).

Пример 19.1. **Расчет колебательных и вращательных уровней молекулы водорода.**

Допустим, что молекула водорода находится в основном электронном состоянии. Движение ядер изучается путем решения уравнения Шредингера. В данном случае оно имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M_1}\Delta_{R_1}-\frac{\hbar^2}{2M_2}\Delta_{R_2}+U(R)\,\varphi(\vec{R}_1,\vec{R}_2)\right)=E_\varphi(\vec{R}_1,\vec{R}_2),$$

где $U(R)$ — энергия электронной подсистемы. Поскольку она зависит только от расстояния между ядрами, потенциальное силовое поле является центральным.

Движение системы из двух частиц может быть сведено к поступательному движению их центра масс и относительному движению вокруг центра масс. Относительное движение, которое только нас и интересует, в некотором приближении раскладывается на вращательное и колебательное движение ядер.

Как было показано ранее (см. § 14), задача двух частиц сводится к одночастичной, причем масса принимается равной приведенной массе системы: $\mu=\frac{M_1M_2}{M_1+M_2}$. Поэтому нужно решить уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_R+U(R)-E\right)\psi(\vec{R})=0,$$

где $\vec{R}=\vec{R}_2-\vec{R}_1$. Заранее известно, что $\psi(\vec{R})=\frac{f(R)}{R}Y_{lm}(\Theta,\varphi)$, $Y_{lm}$ — сферическая функция индексов $l$ и $m$. Множитель $f(R)$ находится из решения радиального волнового уравнения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dR^2}+U(R)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu R^2}-E\right]f(R)=0. \qquad (19.14)$$

Пусть $R_0$ — точка минимума потенциала $U(R)$. При малых отклонениях от положения равновесия:

$$U(R) \approx U(R_0) + \frac{k}{2}(R - R_0)^2,$$

где $k$ — постоянная величина.

Так как приведенная масса $\mu$ достаточно велика, то центробежный член в уравнении (19.14) мал. Поэтому допустимо полагать, что

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2} \approx \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2},$$

если движение частицы происходит вблизи точки $R_0$. С учетом сделаиных замечаний уравнеиие (19.14) упрощается:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dR^2} + \frac{k}{2}(R - R_0)^2 - E^1 \right] f(R) = 0, \qquad (19.15)$$

где

$$E^1 = E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2} - U(R_0).$$

Уравиение (19.15) описывает гармоиический осциллятор, энергия которого принимает зиачения:

$$E^1 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

В итоге для энергии молекулы получаем приближенное выражение

$$E = U(R_0) + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2}.$$

Отдельные слагаемые определяют электронную колебательную и вращательиую составляющие полной энергии (рис. 19.7).

## § 20. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**20.1. Магнитный момент атома.** Магнитный момент атома складывается из орбитального и спинового магнитных моментов. Оператор этой величины записывается как векторная сумма операторов:

$$\hat{\vec{M}} = \hat{\vec{M}}_L + \hat{\vec{M}}_S.$$

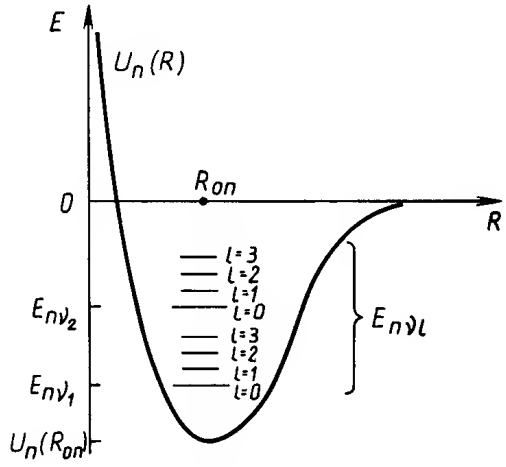



Рис 19 7

Используя формулы (12.6) и (13.7), его можно представить в виде

$$\hat{\vec{M}} = -\frac{M_Б}{\hbar}(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}) = -\frac{M_Б}{\hbar}(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}), \qquad (20.1)$$

где $\vec{J}$ — полный момент импульса электрона.

Таким образом, задача по вычислению модуля и проекций полного магнитного момента атома сводится к работе с оператором $\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}$, что требует специального анализа этого нового в нашем курсе оператора. Выскажем предварительно некоторые общие качественные положения относительно магнитного момента атома.

В простейших случаях, когда один из моментов $\vec{L}$ или $\vec{S}$ равен нулю, магнитный момент определяется другим моментом, неравным нулю. Так, магнитный момент ортогелия в основном состоянии $^3S_1$ обусловлен только спиновым магнитным моментом в соответствии с формулой (20.1), а также (13.7):

$$M = 2\sqrt{3}\, M_Б.$$

Магнитный момент парагелия в основном состоянии $^1S_0$ отсутствует, а в других состояниях обусловлен орбитальным моментом. Например, для $^1P_1$ он определяется выражением

$$M = \sqrt{2}\, M_Б.$$

У многоэлектронных атомов встречаются невозбужденные состояния с нулевыми значениями полного спина и с небольшими значениями магнитного момента, вызванного орбитальным движением электронов. Это парамагнитные вещества. Если и орбитальный момент нулевой, как это имеет место, например, у инертных газов, то вещество диамагнитно. У атомов ферромагнитных веществ имеется отличный от нуля суммарный спин и соответствующий ему магнитный момент (за счет нескомпенсированных спинов на внутренней незаполненной оболочке).

Проведем теперь необходимый краткий анализ оператора магнитного момента (20.1). Это выражение удобно для дальнейшего исследования, так как состояния атома с учетом магнитных взаимодействий описываются волновыми функциями, которые являются собственными функциями операторов $\hat{\vec{J}}^2$, $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$ и $\hat{J}_z$. Перечисленные величины имеют определенные значения наряду с энергией. Их значения определяются квантовыми числами $j$, $l$, $s$, $m_j$ соответственно

Покажем, что в указанных состояниях имеет также определенное значение величина магнитного момента и его проекции на направление вектора $\vec{J}$. Действительно, операторы $\hat{M}^2$ и $\hat{\vec{M}}\hat{\vec{J}}$ могут быть выражены через $\hat{J}^2$, $\hat{L}^2$ и $\hat{S}^2$:

$$\hat{M}^2 = \frac{M_Б^2}{\hbar^2}(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}})^2 = \frac{M_Б^2}{\hbar^2}(2\hat{J}^2 + 2\hat{S}^2 - \hat{L}^2),$$

$$\hat{\vec{M}}\hat{\vec{J}} = -\frac{M_Б}{\hbar}(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}})(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}) = -\frac{M_Б}{2\hbar}(3\hat{J}^2 - \hat{L}^2 + \hat{S}^2). \qquad (20.2)$$

Эти результаты получают наглядное толкование в рамках векторной модели (рис. 20.1). Считается, что вектор $\vec{M}$ быстро процессирует вокруг вектора $\vec{J}$, причем угол между векторами не изменяется. Заметим, что магнитный момент $\vec{M}$ не направлен по механическому моменту $\vec{J}$; поэтому нельзя написать векторные формулы типа (12.6), (13.7) для всего атома в целом. Однако благодаря постоянству угла между векторами $\vec{M}$ и $\vec{J}$ проекции их на некоторую ось $Oz$ пропорциональны друг другу; следовательно, $M_z$ определяется тем же квантовым числом $m_j$, что и $J_z$.

Выведем некоторые соотношения, полезные для дальнейших расчетов. Представим оператор $\hat{\vec{M}}$ в виде

$$\hat{\vec{M}} = \hat{\vec{G}}\hat{\vec{J}}. \qquad (20.3)$$

Чтобы найти оператор $\hat{G}$, умножим равенство (20.3) на $\vec{J}$. Учитывая соотношение (20.2), получаем

$$\hat{\vec{G}}\hat{\vec{J}}^2 = -\frac{M_Б}{2\hbar}(3\hat{J}^2 - \hat{L}^2 + \hat{S}^2). \qquad (20.4)$$

Введем теперь оператор $\hat{J}^{-2}$, обратный к $\hat{J}^2$. Он определяется соотношением

$$\hat{J}^{-2}\hat{J}^2 = 1.$$

Заметим, что обратный оператор, если он существует, всегда коммутирует с исходным. Оба оператора имеют общую систему собственных функций, а собственные значения обратного оператора равны единице, деленной на собственные значения прямого оператора.

Умножая равенство (20.4) на $\hat{J}^{-2}$, находим, что

$$\hat{G} = -\frac{M_Б}{\hbar}\left[1 + \frac{1}{2}\hat{J}^{-2}(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2)\right]. \qquad (20.5)$$

Из формулы (20.5), в частности, вытекает, что проекция магнитного момента атома на ось $Oz$ пропорциональна проекции полного момента импульса и определяется магнитным квантовым числом $m_j$; это видно из соотношения (20.3), если подставить туда оператор (20.5).

**20.2. Уровни энергии атома, находящегося в магнитном поле.** Если атом помещен во внешнее магнитное поле, то магнитный момент атома взаимодействует с полем. Влияние этого взаимодействия на стационарное состояние атома, на соответствующие уровни энергии и предстоит выяснить.

Пусть индукция внешнего поля $\vec{B}$ много меньше по модулю индукции внутриатомного магнитного поля, созданного орбитальными и спиновыми магнитными моментами электронов. В таком случае структура атома при помещении его в поле в основных чертах сохранится, но взаимодействие с внешним полем дает дополнительный вклад в уровни энергии.

Для расчета новых уровней энергии можно применить теорию возмущений. Проведем с ее помощью качественный анализ явления

расщепления уровней энергии — соответственно линий в спектре излучения атома при помещении его в магнитное поле. Это явление носит название эффекта Зеемана.

В нулевом приближении без учета внешнего поля уровни энергии атома определяются, как это показано ранее в § 18, п. 4, набором квантовых чисел $l$, $s$, $j$. Каждому значению квантового числа $j$ соответствует своя линия в тонкой структуре, а от проекции момента — магнитного числа $m_j$ — уровни не зависят, т. е. они вырождены по $m_j$ с кратностью $2j+1$.

Если теперь учесть взаимодействие магнитного момента атома с внешним полем, то в первом приближении теории возмущений поправка к энергии невозмущенного состояния $\Delta E^{(1)}$ определяется взаимным положением векторов $\vec{M}$ и $\vec{B}$, зависит от проекции $\vec{M}$ на $\vec{B}$. В свою очередь проекция $M_z$ определяется значением магнитного числа $m_j$, откуда и следует, что уровень энергии $E_l^{(0)}{}_{s,\,j}$, вырожденный по числу $m_j$, распадается в результате воздействия внешнего поля на $2j+1$-подуровень. Эти простые соображения с качественной стороны полностью исчерпывают эффект Зеемана.

Произведем количественный расчет поправки к атомному уровню энергии водорода в первом приближении теории возмущений. Оператор Гамильтона рассматриваемой системы состоит из двух слагаемых:

$$\widehat{H}=\widehat{H}_0-\widehat{\vec{M}}\,\widehat{\vec{B}},$$

где $\widehat{H}_0$ — гамильтониан атома водорода в отсутствие поля. Второе слагаемое есть потенциальная энергия магнитного диполя $\vec{M}$ во внешнем магнитном поле.

Выберем в качестве невозмущенной системы изолированный атом. Его состояние описывается функцией $\psi_{njlm_j}$, которая является собственной функцией операторов $\widehat{H}_0$, $\widehat{J}^2$, $\widehat{J}_z^2$, $\widehat{S}^2$ и $\widehat{L}^2$. (Заметим, что $\psi$ — двухрядная матрица-столбец, однако в выполняемом далее расчете эта деталь может быть опущена.) Уровни энергии атома зависят от квантовых чисел $n$, $l$ и $j$. Они вырождены по квантовому числу $m_j$, определяющему проекцию полного момента импульса $J_z$ (см. § 16, п. 4).

Возмущение, связанное с действием магнитного поля, задано оператором $\widehat{V}=-\widehat{\vec{M}}\,\widehat{\vec{B}}$. Направим ось $Oz$ по вектору $\vec{B}$. Такой выбор направления оси естествен: при наличии поля пространство уже неизотропно, в нем существует выделенное направление. Теперь согласно выражениям (20.3) и (20.5)

$$\widehat{V}=-B\widehat{M}_z=\frac{BM_\text{Б}}{\hbar}\left[1+\frac{1}{2}\,\widehat{J}^{-2}\left(\widehat{J}^2+\widehat{S}^2-\widehat{L}^2\right)\right]\widehat{J}_z.$$

Действие оператора $\widehat{V}$ на функцию $\psi_{njlm_j}$ выражается равенством

$$\widehat{V}\psi_{njlm_j}=m_jBM_\text{Б}\left[1+\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}\right]\psi_{njlm_j}.$$

Поэтому поправки первого порядка к уровням энергии легко находятся:

$$\Delta E^{(1)}=m_jBM_\text{Б}g\int\psi^*_{njlm_j}\psi_{njlm_j}\,dV=m_jBM_\text{Б}g,$$

где

$$g=1+\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(J+1)}-$$

так называемый *множитель Ланде*.

Существенно, что поправка зависит от квантового числа $m_j$. Вследствие этого ранее вырожденный уровень энергии с заданными значениями $n$, $l$ и $j$ расщепля-

ется на $2j+1$-подуровней, отстоящих друг от друга на одинаковые расстояния $BM_Bg$. Расщепление обнаруживается на опыте: при включении поля линии спектра излучения атома распадаются на несколько компонент.

Полученные результаты применимы к водороду. Кроме того, они могут быть использованы почти целиком для любого атома, у которого имеются состояния, характеризуемые суммарным орбитальным моментом, суммарным спином и полным механическим моментом.

Качественный анализ и расчет уровней энергии, произведенный выше, справедливы только для достаточно слабых полей. Применение теории возмущений законно, если расстояния между уровнями тонкой структуры много больше интервала между подуровнями, вызванными внешним полем. Оценки показывают, что для нижних энергетических состояний атома водорода слабыми должны считаться поля с индукцией до 0,1 Тл. В сильных полях расчет видоизменяется (см. упражнение 7 к главе VI).

**20.3. Парамагнитные и диамагнитные свойства атомов.** Как известно, вещество при помещении его в магнитное поле само приобретает магнитные свойства, но намагничиваются разные вещества поразному. Намагничивание вещества обусловлено влиянием внешнего поля на электроны, входящие в состав вещества, и действием его на магнитные моменты атомов, складывающиеся из магнитных моментов электронов. Рассмотрим в самых общих чертах это действие.

Однородное магнитное поле с индукцией $\vec{B}$ можно описать с помощью вектора-потенциала:

$$\vec{A}=\frac{1}{2}[\vec{B}\,\vec{r}]. \tag{20.6}$$

Действительно, вычисление показывает, что

$$\operatorname{rot}\vec{A}=\vec{B}.$$

Классическая функция Гамильтона для электрона, находящегося в электромагнитном поле, имеет вид (ч. I, пример 22.3)

$$H=\frac{1}{2\mu}(\vec{p}+e\vec{A})^2-e\varphi, \tag{20.7}$$

где $\mu$ — масса (или приведенная масса) частицы; $\vec{p}$ — ее обобщенный импульс; $\vec{A}$ — векторный, а $\varphi$ — скалярный потенциалы поля; $e$ — модуль заряда электрона. Подставляя выражение (20.6) в формулу (20.7) и раскрывая скобки, получаем

$$H=\frac{p^2}{2\mu}-\vec{M}\,\vec{B}+\frac{e^2}{8\mu}[\vec{B}\,\vec{r}]^2-e\varphi,$$

где

$$\vec{M}=-\frac{e}{2\mu}[\vec{r}\,\vec{p}]-$$

дипольный магнитный момент орбитального движения электрона.

При переходе к квантовой механике соответствующие величины заменяются операторами. Оператор Гамильтона для электрона, нахо-

дящегося в электромагнитном поле, записывается в следующем виде:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\hat{\vec{M}}\,\vec{B}-e\varphi+\frac{e^2}{8\mu}[\vec{B}\,\vec{r}]^2. \qquad (20.8)$$

(При выводе этой формулы под $\vec{M}$ понимался только магнитный орбитальный момент отдельного электрона. В общем случае оператор $\hat{\vec{M}}$ включает в себя орбитальные и спиновые магнитные моменты многоэлектронного атома; см. формулу (20.1).)

Оператор (20.8) мы можем применить к электрону, связанному в атоме, если последний находится во внешнем магнитном поле $\vec{B}$. В таком случае $e\varphi$ есть оператор потенциальной энергии электрона в эффективном электрическом поле атома, а $-\hat{\vec{M}}\vec{B}+\frac{e^2}{8\mu}[\vec{B}\vec{r}]^2$ — оператор взаимодействия электрона с внешним магнитным полем, относимый к возмущению.

Если учесть только оператор $-\hat{\vec{M}}\vec{B}$, то, как это было показано в § 20, п. 2, становится понятным расщепление уровней энергии атома во внешнем магнитном поле. Кроме того, из соотношения (20.8) следует, что потенциальная энергия атома, находящегося во внешнем магнитном поле, определяется двумя членами:

$$\hat{U}=-\hat{\vec{M}}\vec{B}+\frac{e^2}{8\mu}[\vec{B}\vec{r}]^2$$

Рассмотрим сначала первое слагаемое. Ему соответствует отрицательное значение энергии взаимодействия, если вектор $\vec{M}$ направлен по полю $\vec{B}$. В состоянии термодинамического равновесия все атомы стремятся занять наименьшее по энергии состояние. Это означает, что магнитные моменты атомов ориентируются по полю, вещество намагничивается, суммарное поле в веществе усиливается. Как известно, такое явление называется парамагнетизмом.

В общих чертах так же происходит намагничивание ферромагнитных веществ, но магнитные моменты их атомов обусловлены спиновыми магнитными моментами электронов.

Обратимся ко второму слагаемому в выражении для $\hat{U}$. Заметив, что рассматриваемый оператор существенно положителен, представим его как энергию некоторого дополнительного магнитного дипольного момента атома $\vec{M}_g$ в магнитном поле $\vec{B}$:

$$\frac{e^2}{8\mu}[\vec{B}\vec{r}]^2=-\vec{M}_g\vec{B}.$$

(Оператор $\vec{M}_g$ является некоторой функцией $\vec{r}$ и, конечно, свойств оператора момента импульса не имеет.)

Направляя ось $Oz$ по вектору $\vec{B}$, раскроем векторное и скалярное произведения в левой части равенства:

$$\left[\frac{e^2B}{8\mu}(x^2+y^2)\right]B=-\vec{M}_g\vec{B}.$$

Отсюда и находим модуль дополнительного магнитного момента атома:

$$M_g = \frac{e^2 B}{8\mu}(x^2 + y^2).$$

Направлен же он всегда навстречу вектору $\vec{B}$. Это означает, что дополнительный момент всегда устанавливается против поля. Таким образом, оператор $\vec{M}_g$ обусловливает диамагнитные свойства атомов вещества.

Добавка к энергии в первом приближении теории возмущений равна среднему от оператора возмущеня по невозмущенному состоянию. Диамагнитный член увеличивает энергию атома на величину, равную

$$\frac{e^2 B^2}{8\mu}\overline{(x^2 + y^2)},$$

где интегрирование при усреднении проведено по объему атома. Понятно, что для многоэлектронного атома диамагнитные моменты отдельных электронов складываются; складываются и соответствующие им энергии.

В слабых магнитных полях увеличение энергии за счет диамагнитного взаимодействия много меньше энергии парамагнитного взаимодействия, не говоря уже о ферромагнитном. Поэтому диамагнитными эффектами в водороде можно пренебречь. Диамагнетизм вещества проявляется в том случае, если полный магнитный момент атома равняется нулю. Это осуществляется, например, у атомов инертных газов, в частности у гелия.

## Методические указания и рекомендации

**1.** Глава посвящена важнейшим приложениям квантовой механики системы частиц в атомной физике. Центральные вопросы главы — атом гелия, теория периодической системы элементов и молекула водорода. В соответствующих параграфах курса на элементарном уровне достаточно полно и подробно изложен нужный материал. По ним необходимы лекционные занятия, сопровождающиеся подробными выкладками и иллюстрацией отдельных положений на практических занятиях.

Кроме этих основных вопросов, рассмотрены и другие приложения квантовой механики к атомной физике. Их можно считать конкретными примерами на применение теории.

Существен для углубленного понимания роли различных взаимодействий в атоме параграф об уровнях энергии многоэлектронного атома (см. § 18, п 4). Полезно привлечь внимание студентов к наглядной интерпретации сил химической связи между атомами (см. § 19, п. 3), организовав выступления на семинаре. Наконец, имеется возможность сравнительно простого объяснения парамагнитных и диамагнитных свойств атомов (см. § 20, п. 3). Соответствующие доклады можно поставить на семинарском занятии.

**II.** При изучении главы читателю полезно ответить на вопросы и выполнить упражнения:

— Опишите характер силового поля, в котором движется валентный электрон в атоме щелочного элемента. Что означает выражение: «Вырождение уровня энергии по квантовому числу $l$ снимается, если поле имеет некулоновский характер»? Перечислите и обсудите допущения, лежащие в основе теории периодической системы элементов. Составьте краткий конспект ответа по теории периодической системы. Запишите гамильтониан задачи об атоме гелия и истолкуйте все его слагаемые. Объясните природу двух разновидностей состояний атомов гелия. Обсудите возникновение обменных взаимодействий и связь их со спинами частиц Проследите связь между величиной взаимодействий в атоме с приближениями в анализе атомных уровней энергии. Приведите примеры электронных конфигураций и соответствующих им термов. Разберите этапы решения задачи о молекуле водорода на качественном уровне: постановка задачи, гамильтониан и т. д.

**III.** При урезанном курсе (на некоторых специальностях) этой главой квантовая механика заканчивается. В таком случае необходимо сделать обзор ее неизученных частей: теории рассеяния и излучения.

### Упражнение VI

**1.** Определите возможные ориентации спинов электронов в слоях и оболочках атома железа. Электронная конфигурация:

$$(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^6\,(4s)^2.$$

Ответ.

В заполненных оболочках четное число электронов, причем имеются пары с одинаковыми квантовыми числами $n$, $l$ и $m$. В пару входят электроны с антипараллельными спинами. В оболочке $3d$ из десяти возможных состояний заполнено 6. При $l=2$ имеется пять состояний с различными значениями магнитного квантового числа. Поэтому 5 из 6 электронов могут иметь одинаково направленные спины. За счет этого атомы железа обладают значительным магнитным моментом.

**2.** Опишите возможные состояния атома углерода ${}_6C$ (при заполненных оболочках $1s$ и $2s$).

**3.** Найдите возможные состояния атома ${}_4Be$ (при заполненной $1s$-оболочке).

**4.** Рассмотрите различные схемы образования поправки к уровню энергии атома с двумя внешними электронами, обусловленной магнитными взаимодействиями. Изучите отдельно взаимодействия типа спин — орбита, спин — спин и орбита — орбита, вызывающие различное расщепление уровней нулевого приближения, соответствующих заданной конфигурации.

**5.** Вычислите энергию основного состояния атома гелия в первом приближении теории возмущений.

Указание. Воспользуйтесь формулой

$$\int \frac{e^{-\alpha r_1-\beta r_2}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\,dV_1dV_2=32\pi^2\,\frac{\alpha^2+\beta^2+3\alpha\beta}{\alpha^2\beta^2(\alpha+\beta)^3}\,.$$

**6.** Рассмотрите расщепление уровней энергии атома водорода на подуровни в слабом магнитном поле с помощью полуклассической векторной модели.

Решение.

Из формул

$$\vec{M}_L=-g_L M_Б\frac{1}{\hbar}\vec{L},\ \vec{M}_S=-g_S M_Б\frac{1}{\hbar}\vec{S}$$

следует

$$\frac{M_L}{L}=\frac{e}{2\mu},\ \frac{M_S}{S}=\frac{e}{\mu}$$

Векторы $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$ и $\vec{M}=\vec{M}_L+\vec{M}_S$ неколлинеарны, так как гиромагнитные отношения для спина и орбитального момента неодинаковы (см. рис. 20.2).

Векторы $\vec{L}$ и $\vec{S}$ быстро вращаются вокруг вектора $\vec{J}$. Вместе с ними процессирует и магнитный момент $\vec{M}$. Разложим его на две составляющие: вдоль и поперек вектора $\vec{J}$. Они обозначаются $\vec{M}_{\parallel}$ и $\vec{M}_{\perp}$.

Добавочная энергия, приобретаемая атомом во внешнем магнитном поле, определяется равенством

$$W=-\vec{M}\vec{B}.$$

Ее следует рассматривать как малое возмущение. Под действием поля происходит изменение уровней энергии на величину

$$\Delta E=-\overline{\vec{M}\vec{B}}=-\overline{M_zB}.$$

(Вектор $\vec{B}$ направлен по оси $Oz$.) Усреднение производится по невозмущенному состоянию, т. е. в предположении, что поле отсутствует.

При нахождении $\bar{M}_z$ учтем, что

$$\bar{M}_z=\bar{M}_{\parallel z}+\bar{M}_{\perp z}.$$

Второе слагаемое можно считать равным нулю, так как вектор $\vec{M}$ очень быстро вращается вокруг вектора $\vec{J}$.

Как видно из рисунка 20.2,

$$M_{\parallel}=M_S\cos(\widehat{\vec{S}\vec{J}})+M_L\cos(\widehat{\vec{L}\vec{J}})=M_S\frac{J^2-L^2+S^2}{2SJ}+M_L\frac{J^2+L^2-S^2}{2LJ}\,.$$

Отсюда получаем

$$M_{\parallel}=gM_Б\frac{1}{\hbar}J,$$

где

$$g=1+\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{2j(j+1)}\,.$$

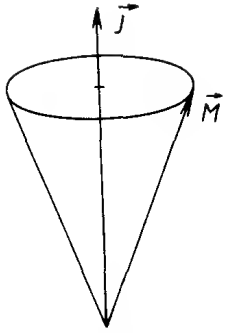



Рис 20 1.

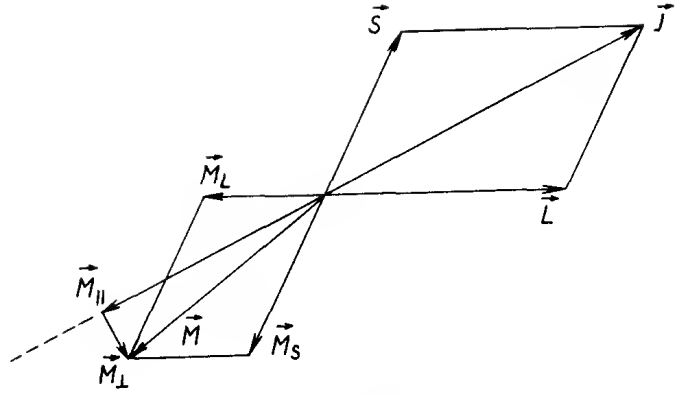



Рис. 20.2.

Вектор $\vec{J}$ процессирует вокруг оси $Oz$, причем его величина и угол наклона к оси сохраняются. То же самое будет происходить с вектором $\vec{M}_{\parallel}$. Поэтому

$$M_{\parallel z} = -gM_{\text{Б}}\frac{1}{\hbar}J_z = -gM_{\text{Б}}m_j.$$

Для уровней энергии получим поправку:

$$\Delta E = gM_{\text{Б}}Bm_j.$$

**7.** Найдите расщепление уровней энергии $1s$, $^2S_{1/2}$; $2p$, $^2P_{3/2}$; $2p$, $^2P_{1/2}$ атома водорода в слабом магнитном поле.

**8.** Найдите расщепление уровней энергии атома водорода в сильном магнитном поле.

В очень сильных полях разрывается связь спинового и орбитального магнитных моментов, и они взаимодействуют с внешним полем независимо. Это означает, что спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь.

В качестве невозмущенной системы следует выбрать изолированный атом водорода в состояниях, описываемых волновыми функциями (13.9). Эти состояния характеризуются набором величин $E$, $L$, $L_z$, $S$, $S_z$. Им соответствуют квантовые числа $n$, $l$, $m_e$, $s$ и $m_s$. Уровни энергии нулевого приближения (11.7) зависят только от главного квантового числа.

Возмущение, возникающее вследствие магнитного поля, сейчас удобнее представить с помощью (20.1) в виде

$$\vec{V} = -\hat{\vec{M}}\vec{B} = \frac{M_{\text{Б}}B}{\hbar}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z).$$

Добавка к уровням энергии в первом приближении теории возмущений

$$\Delta E^{(1)} = \frac{M_{\text{Б}}B}{\hbar}\int \psi^*_{nlm_l}U^+_{m_s}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\,\psi_{nlm_l}\,U_{m_s}dV = M_{\text{Б}}B\,(m_l + 2m_s).$$

Таким образом, в сильных магнитных полях вырождение по квантовым числам $m_l$ и $m_s$ частично снимается. Уровень энергии, соответствующий заданным значениям $n$ и $l$, распадается на столько подуровней, сколько различных значений может иметь сумма $(m_l+2m_s)$.

# ГЛАВА VII. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ. ИСПУСКАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА АТОМАМИ

До сих пор в курсе рассматривались частицы или системы частиц в стационарных полях и основной целью было отыскание стационарных состояний изучаемых объектов, что достигалось с помощью уравнения Шредингера без времени. Однако существенно важны также случаи, когда система находится в переменных полях, испытывает внешнее воздействие, зависящее от времени. Для решения соответствующих задач необходимо использовать полное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi, \tag{21.1}$$

где $\widehat{H}=\widehat{H}(\vec{r},\ t)$. Это уравнение и должно дать описание изменения состояния с течением времени в виде зависимости $\psi=\psi(\vec{r},\ t)$. В общем случае эта зависимость не сводится к гармонической функции $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, известной для стационарных состояний.

В качестве примера укажем на взаимодействие атомов с электромагнитным полем, в результате которого стационарное состояние атома изменяется, и атом излучает или поглощает свет. Тепловое излучение газообразных тел на атомном уровне имеет ту же природу, но несколько иной механизм: атомы в тепловом движении сталкиваются, в результате чего на оптические электроны одного атома краткое время действует внешнее для него электромагнитное поле другого атома, вызывающее излучение.

Точное решение полного уравнения Шредингера в общем случае, т. е. для любых гамильтонианов $\widehat{H}(\vec{r},\ t)$, неизвестно. Поэтому широкое распространение получили приближенные методы решения уравнения (21.1), и один из них — теория нестационарных возмущений. Далее с ее помощью в курсе рассмотрены переходы между стационарными состояниями изолированной системы, испытавшей действие переменного внешнего поля. Такие переходы, сопровождающиеся излучением или поглощением квантов энергии, характерны для микромира. Существование квантов и переходы из одного стационарного состояния в другое были предсказаны в работах Планка, Эйнштейна, Бора. Квантовая механика позволяет дать обоснование первоначальным представлениям о «квантовых скачках» как переходах системы между стационарными состояниями под действием переменного поля.

## § 21. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

**21.1. Функция состояния нестационарной задачи в разложении по стационарным состояниям.** Большое практическое значение имеют нестационарные процессы, происходящие в результате внешнего воздействия в квантовых системах, находящихся в стационарных состояниях благодаря внутренним взаимодействиям. Таковы, например, процессы излучения и поглощения света атомами под действием переменного электромагнитного поля. В простейшем случае речь идет об изменении состояния одной микрочастицы, например электрона в атоме водорода или валентного электрона в атоме щелочного элемента. Ниже излагается теория нестационарных возмущений применительно к одной микрочастице, однако все ее выводы можно обобщить на систему микрочастиц, переходя в формулах к операторам и функциям состояния системы.

Для нестационарных процессов типичен случай, когда оператор Гамильтона частицы можно представить в виде

$$\widehat{H}=\widehat{H}_0(x)+\widehat{V}(x,\ t), \tag{21.2}$$

где $x$ обозначает совокупность пространственных переменных. Оператор $\widehat{H}_0(x)$ не зависит от времени. Это гамильтониан частицы, находящейся в постоянном поле, созданном внутренним взаимодействием и движением частиц в системе, куда входит и рассматриваемая частица; $V(x,\ t)$ есть оператор, выражающий внешнее воздействие на частицу,— это оператор потенциальной энергии некоторого переменного поля.

Запишем уравнение (21.1) с оператором (21.2):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=[\widehat{H}_0(x)+V(x,\ t)]\,\psi. \tag{21.3}$$

Его точное решение в большинстве практически важных случаев неизвестно. Теория нестационарных возмущений, дающая приближенные решения, применяется при условии, что известны решения уравнения с гамильтонианом $\widehat{H}_0(x)$. Они являются волновыми функциями стационарных состояний изучаемой частицы, которые имеют место, если на нее переменное поле не действует:

$$\psi_k(x,\ t)=\varphi_k(x)\,e^{-i\omega_k t},\ \omega_k=\frac{E_k}{\hbar},\ k=1,\ 2,\ 3\ \ldots \tag{21.4}$$

Здесь функции $\varphi_k(x)$ удовлетворяют уравнению для собственных функций и собственных значений оператора Гамильтона $\widehat{H}_0(x)$:

$$H_0\varphi_k(x)=E_k\varphi_k(x), \tag{21.5}$$

они ортонормированы.

Слагаемое $\widehat{V}(x,\ t)$ в гамильтониане (21.2) считается много меньшим $\widehat{H}_0(x)$, если внешнее поле много слабее внутреннего в системе микрочастиц, и соответствующие внешнему полю энергии взаимодействия можно считать малыми по сравнению с $E_k$. В таком случае

оператор внешнего переменного поля $V(x, t)$ приннмается за оператор возмущения и применима теория нестационарных возмущений, суть которой состоит в следующем.

Представим точную функцию состояния частицы $\psi(x, t)$ в виде суперпозиции волновых функций стационарных состояний невозмущенной задачи:

$$\psi(x, t)=\sum_k C_k(t)\,\varphi_k(x)\,e^{-i\omega_k t}, \tag{21.6}$$

где индексом $k$ обозначен номер стационарного состояния или совокупность квантовых чисел, определяющих состояние.

С физической точки зрения такое представление волновой функции частицы в эволюционирующей с течением времени системе имеёт смысл при условии, если переменное поле не вызывает разрушения структуры системы, а также изменения ее состава и внутренних параметров входящих в систему частиц, таких, как масса, электрический заряд, спин. Это значит, что функции стационарных состояний, по которым проведено разложение, содержат некоторую информацию о состоянии нестационарной системы, так как относятся к тем же частицам.

С математической точки зрения особенность данного представления состоит в том, что коэффициенты $C_k$ в равенстве (21.6) зависят от времени. Равенство справсдливо, если его правая часть есть решение уравнения (21.3), а этого можно добиться только за счет специального подбора неизвестных коэффициентов $C_k(t)$.

Если подставить функцию (21.6) в уравнение (21.3), то получим равенство

$$i\hbar\sum_k\left(\frac{dC_k}{dt}\varphi_k e^{-i\omega_k t}-i\omega\varphi_k e^{-i\omega_k t}\right)=\sum_k C_k e^{-i\omega_k t}\widehat{H}_0\varphi_k+\sum_k C_k\widehat{V}\varphi_k e^{-i\omega_k t}.$$

Его можно упростить, используя (21.5)

$$i\hbar\sum_k\frac{dC_k}{dt}\varphi_k(x)\,e^{-i\omega_k t}=\sum_k C_k\widehat{V}(x, t)\,\varphi_k(x)\,e^{-i\omega_k t}.$$

Умножим теперь последнее равенство на $\varphi_m^*(x)$ и проинтегрируем по переменной $x$. Учитывая ортонормированность функций $\varphi_k$, находим

$$\frac{dC_m}{dt}=-\frac{i}{\hbar}\sum_k C_k(t)\,V_{mk}(t)\,e^{i\omega_{mk}t}, \tag{21.7}$$

где величины

$$V_{mk}(t)=\int\varphi_m^*(x)\,\widehat{V}(x, t)\,\varphi_k(x)\,dx \tag{21.7а}$$

называются *матричными элементами переходов* $k\to m$, а величины

$$\omega_{mk}=\frac{E_m-E_k}{\hbar}$$

частотами переходов

Разложение (21.6) является решением нестационарного уравнения (21.1), если коэффициенты разложения $C_k(t)$ удовлетворяют уравнениям (21.7).

Пока что никаких приближений не вводилось. Система уравнений (21.7) является точной, а решение ее в общем виде так же неизвестно, как и для исходного уравнения. Но сведение уравнения (21.3) к системе (21.7) продвигает нас в изучении нестационарных состояний в двух направлениях: система (21.7) допускает применение приближенных методов решения, а разложение (21.6) дает возможность исследовать нестационарные состояния через стационарные.

В соответствии с принципом суперпозиции состояний (см. § 2) квадраты модулей коэффициентов разложения (21.5) на языке вероятностных представлений выражают «участие» стационарных состояний (21.3) в нестационарном. Если вспомнить, что при нестационарном состоянии системы энергия ее не имеет определенного значения, то вероятность обнаружения того или иного значения энергии как раз и определяется величиной $C_k^*(t)\,C_k(t)$.

Далее решение нестационарного уравнения Шредингера отыскивается в виде разложения по функциям стационарных состояний (21.6). Коэффициенты разложения $C_k(t)$ удовлетворяют уравнениям (21.7). Квадраты их модулей дают вероятность получения известных из соответствующей стационарной задачи значений энергии $E_k$. Поэтому надо находить коэффициенты $C_k(t)$.

**21.2. Вычисление коэффициентов разложения при «включении» и «выключении» возмущения.** Для вычисления коэффициентов $C_k(t)$ воспользуемся приближенным методом. Учитывая, что функция $\psi(x,\ t)$ медленно изменяется с течением времени ввиду малости возмущения, представим коэффициенты разложения (21.6) в виде сумм:

$$C_k(t)=C_k^{(0)}(t)+C_k^{(1)}(t)+C_k^{(2)}(t)+\ldots, \tag{21.8}$$

где $C_k^{(1)}$, $C_k^{(2)}$, ...— последовательность убывающих величин, которые можно назвать поправками к коэффициентам $C_k^{(0)}$. В нулевом приближении коэффициенты разложения поправок не имеют: $C_k(t)=C_k^{(0)}(t)$. В первом приближении они берутся с первой поправкой: $C_k(t)=C_k^{(0)}+C_k^{(1)}$, во втором — с первой и второй поправками: $C_k(t)=C_k^{(0)}+C_k^{(1)}+C_k^{(2)}$ и т. д.

Сузим условия задачи о нестационарном состоянии, сформулированные в предыдущем пункте, следующим дополнительным условием: внешнее поле «включается» в момент времени $t=0$ и «выключается» при $t=\tau$. Иными словами, при $t\leqslant 0$ $\widehat{V}(x,\ t)=0$ и при $t\geqslant\tau$ $\widehat{V}(x,\ t)=0$. Такая ситуация также характерна для многих взаимодействий в микромире, как и условие (21.2). Например, на атом падает цуг электромагнитных волн, имеющий начало и конец; атомы сталкиваются друг с другом в тепловом движении, в результате чего испытывают кратковременное действие «чужих» полей, и т. д.

Теперь уравнения (21.7) нужно решать при следующем начальном условии:

$$\psi(x, 0)=\varphi_n(x), \tag{21.9}$$

т. е. физическая система находилась до включения возмущения в некотором стационарном состоянии $n$ (причем $n=1, 2, 3, \ldots$).

Разложение (21.6) приобретает вид

$$\psi(x, t)=\sum_k C_{kn}(t)\,\varphi_k(x)\,e^{-i\omega_k t}, \tag{21.10}$$

где вторым индексом $n$ при коэффициенте $C_{kn}$ указано начальное состояние системы.

Используя условие (21.9), находим, что при $t=0$

$$C_{kn}=\delta_{kn}. \tag{21.11}$$

В нулевом приближении теории возмущений следует считать $\widehat{V}(x, t)=0$ на всем протяжении действия возмущения. Тогда равны нулю и все матричные элементы $V_{mk}$. Из уравнения (21.7) следует

$$\frac{dC_{mn}^{(0)}(t)}{dt}=0,$$

или

$$C_{mn}^{(0)}(t)=\text{const}.$$

В соответствии с равенством (21.11) имеем

$$C_{mn}^{(0)}=\delta_{mn}, \tag{21.12}$$

а разложение (21.10) дает

$$\psi^{(0)}(x, t)=\varphi_n(x)\,e^{-i\omega_n t}.$$

Таким образом, в нулевом приближении состояние системы просто не изменяется, как и должно быть в отсутствие переменного поля.

Для отыскания первого приближения подставим в уравнения (21.7) неизвестные коэффициенты, взятые в первом приближении по формуле (21.8) с учетом (21.12): $C_{kn}(t)=\delta_{kn}+C_{kn}^{(1)}(t)$. Получим систему дифференциальных уравнений для нахождения неизвестных поправок $C_{mn}^{(1)}(t)$; при этом пренебрегаем слагаемыми, содержащими произведения малых величин $C_{kn}^{(1)}$ и $V_{mn}$:

$$\frac{dC_{mn}^{(1)}}{dt}=-\frac{i}{\hbar}V_{mn}(t)\,e^{i\omega_{mn}t}.$$

Интегрирование этих уравнений с разделяющимися переменными дает

$$C_{mn}^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int V_{mn}(t)\,e^{i\omega_{mn}t}dt+\text{const}. \tag{21.13}$$

Для определения постоянной интегрирования в решении (21.13) не-

обходимо взять интеграл, а это нельзя сделать, так как не указан конкретный вид $V_{mn}(t)$. Чтобы иметь решение, удовлетворяющее начальным условиям для любых $V_{mn}(t)$, запишем его в виде определенного интеграла для момента времени $t=\tau$. Если первообразную функцию для интеграла в формуле (21.13) обозначить через $\Phi(t)$, то согласно начальному условию (21.12) имеем $\text{const} = -\Phi(0)$. Отсюда и следует

$$C_{mn}^{(1)}(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^{\tau} V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn}t}\, dt. \tag{21.14}$$

При конкретных вычислениях коэффициентов во многих случаях расчеты упрощаются, если сдвинуть начало отсчета времени так, чтобы начало действия возмущения оказалось в точке временной оси $-\frac{\tau}{2}$. Тогда конец его придется на $\frac{\tau}{2}$, а в формуле (21.14) изменятся пределы интегрирования:

$$C_{mn}^{(1)}(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn}t} dt. \tag{21.15}$$

В первом приближении теории возмущений значения коэффициентов в разложении функции состояния найдены:

$$C_{mn}(\tau) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar}\int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn}t} dt. \tag{21.16}$$

Обычно при решении задачи по нахождению функции состояния (21.6) достаточно уже первого приближения. Однако если есть необходимость, то аналогичным способом можно получить второе и последующие приближения.

Подставим в уравнение (21.7) коэффициенты во втором приближении:

$$C_{kn}(t) = \delta_{kn} + C_{kn}^{(1)}(t) + C_{kn}^{(2)}(t).$$

Используя соотношение (21.14) и пренебрегая членами выше второго порядка малости, получим дифференциальные уравнения для нахождения поправок:

$$\frac{dC_{mn}^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\sum_k C_{kn}^{(1)} V_{mk} e^{i\omega_{mk}t}.$$

Отсюда

$$C_{mn}^{(2)}(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k \int_0^{\tau} V_{mk}(t')\, e^{i\omega_{mk}t'}\, C_{kn}^{(1)}(t')\, dt',$$

что с учетом формулы (21.13) дает вторую поправку:

$$C_{mn}^{(2)}(\tau) = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_k \int_0^\tau dt V_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} \int_0^t V_{kn}(t')\, e^{i\omega_{kn}t'} dt'. \qquad (21.17)$$

Ее при необходимости можно записать с симметричными пределами интегрирования: $-\frac{\tau}{2}$ и $\frac{\tau}{2}$; $-\frac{t}{2}$ и $\frac{t}{2}$.

Итак, функции состояния системы в случае зависящего от времени возмущения вычисляются в первом или втором приближении теории возмущений по формулам (21.6), (21.16), (21.17). Подчеркнем, что рассчитываются только функции состояния, а не поправки к уровню энергии невозмущенной задачи, как это делалось в теории стационарных возмущений в § 16. Сейчас поле нестационарно и энергия системы определенного значения не имеет.

**21.3. Вероятность квантовых переходов.** Как уже говорилось, теория нестационарных возмущений чаще всего применяется к системам, находящимся сначала в стационарных состояниях, затем испытывающих действие внешнего переменного поля, длящееся определенное время. На протяжении действия возмущения функция состояния изменяется, что в нашем решении (см. § 21, п. 2) нашло отражение в зависимости коэффициентов $C_k$ от времени в формуле (21.13). По прекращению действия возмущения коэффициенты прекращают изменяться. Теперь рассматриваемая нами система находится в новом состоянии, описываемом функцией

$$\psi(x,\ t) = \sum_k C_{kn}(\tau)\, \varphi_k(x)\, e^{-i\omega_k t}. \qquad (21.18)$$

Это состояние с неопределенной энергией, т. е. не относится к стационарным, но надо учитывать, что коэффициенты $C_{kn}$ более не зависят от времени.

Квантовая теория не позволяет однозначно предсказать, какой будет энергия системы после снятия возмущения. Статистический характер закономерности проявляется в том, что известен только спектр конечных значений энергии, и можно рассчитать вероятность обнаружения системы в состояниях с различными значениями энергии.

Вероятность обнаружения системы в состоянии $m$, находившейся до внешнего воздействия в состоянии $n$, называют *вероятностью перехода* $n \to m$ и обозначают через $W_{mn}$. Если уровень энергии $E_m$ не вырожден, то $W_{mn}$ есть вероятность обнаружения после прекращения внешнего воздействия значения энергии $E_m$. В случае $s$-кратного вырождения уровня энергии $E_m$ ему соответствуют вероятности $W_{m_1 n}$, $W_{m_2 n}$, ..., $W_{m_s n}$. В результате вероятность обнаружения значения $E_m$ возрастет:

$$W_{mn} = \sum_s W_{m_s n}.$$

(Разумеется, при переходе $n \to m$ аналогично обстоит дело и с другими величинами, принимающими в стационарных состояниях определенные значения, например с моментом импульса.)

*Основная задача при изучении нестационарных процессов состоит в определении вероятностей возможных переходов* $W_{mn}$. В теории возмущений она решается приближенно. В соответствии с толкованием коэффициентов $C_k$ в разложении функции состояния (21.6) по принципу суперпозиции, имеем

$$W_{mn} = C^*_{mn}(\tau)\, C_{mn}(\tau), \tag{21.19}$$

что в первом приближении теории возмущений для переходов $m \neq n$ дает

$$W_{mn} = \frac{1}{\hbar^2}\left| \int\limits_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2. \tag{21.20}$$

Это одна из основных формул квантовой теории нестационарных процессов. Она моделирует изменения, происходящие в физической системе, квантовыми переходами частицы, совершающимися между определенным начальным и возможными конечными состояниями.

Может оказаться, что в первом приближении $W_{mn} = 0$, тогда следует обратиться ко второму приближению. В этом случае

$$W_{mn} = \frac{1}{\hbar^2}\left| \sum_k \int\limits_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt V_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} \int\limits_{-\frac{t}{2}}^{\frac{t}{2}} dt' V_{kn}(t')\, e^{i\omega_{kn}t'} \right|^2. \tag{21.21}$$

Структура формулы (21.21) допускает следующее толкование: переход происходит не прямо из $n$-го состояния в $m$-е, а через все возможные промежуточные состояния, нумеруемые индексом $k$. Промежуточные состояния называют *виртуальными*, чтобы отличить от реально наблюдаемых начального и конечного состояний.

Из формул (21.20) и (21.21), в частности, вытекает, что вероятности прямого и обратного процессов равны друг другу: $W_{mn} = W_{nm}$. Это частный случай очень общей закономерности микромира — *принципа микроскопической обратимости явлений.*

Обратимся к толкованию понятия о вероятности перехода. Как и все вероятностные характеристики в квантовой механике, величины $W_{mn}$ обретают статистический смысл в приложении их ко множеству однородных объектов и явлений. Пусть произошло $N_n$ переходов между состоянием $n$ и разными состояниями $m$, причем $N_n \gg 1$. Тогда числа конкретных переходов находятся по формуле

$$N_{mn} = W_{mn} N_n. \tag{21.22}$$

Особого анализа заслуживает протекание квантового перехода (иногда говорят — «скачка») во времени. Пусть известна вероятность некоторого фиксированного перехода $m - n$ за время $\tau$ и пусть по формуле (21.22) получено число переходов, например $10^6$. В какой момент произошел каждый переход, рассчитать с помощью квантовой механики не представляется возможным. И хотя мы знаем, что переход наступает вследствие эволюции системы на протя-

жении конечного промежутка времени $\tau$, момент наступления каждого из переходов — это отнюдь не конец действия возмущения. Отдельный переход — явление случайное, а все $10^6$ рассматриваемых переходов произошли на протяжении времени $\tau$ (о временной статистике переходов речь пойдет ниже, в § 21, п. 5).

В заключение заметим, что расчет вероятностей переходов как величин $C^*_{mn}C_{mn}$ (формулы (21.20), (21.21)) основан на разложении (21.6). Но коэффициенты разложения в теории возмущений находятся по приближенным формулам (21.8), причем поправки $C^{(1)}_{mn}$, $C^{(2)}_{mn}$ должны быть малыми величинами. Поскольку они растут с течением времени, то рассчитывать вероятности переходов по основной формуле (21.20) можно лишь при небольшом времени действия возмущения. (Конечно, допустимые значения $\tau$ тем больше, чем меньше само возмущение.) Количественные критерии применимости к переходам теории возмущений будут указаны далее.

**21.4. Вероятность переходов в сплошном спектре.** Формула (21.20), как указывалось, является одной из основных в квантовой физике нестационарных процессов. Однако в этом виде она имеет сравнительно ограниченное применение. И причина состоит в том, что вывод ее содержал некоторую непоследовательность: уровни энергии системы полагались дискретными, а переменное поле, вызывающее переход,— непрерывным. Игнорирование квантового характера поля привело к тому, что формула не содержит ряд важных закономерностей. В частности, опыт показывает, что энергия поглощается и излучается только целыми квантами с определенными направлениями спинов, а это никак в формуле (21.20) не отражено.

На практике часто приходится рассматривать переходы в непрерывном спектре. Это осуществляется введением энергетической плотности вероятности перехода:

$$\frac{dW_{m'n}}{dE_{m'}} = \tilde{W}_{m'n}, \tag{21.23}$$

где $dW_{m'n}$ есть вероятность перехода в бесконечно узкую полосу $dE_{m'}$ около фиксированного уровня $E_{m'}$ в непрерывном спектре. (Здесь и далее штрих обозначает, что рассматривается квантовое состояние $m'$ в непрерывном спектре, а вместе с тем и все величины, характеризующие переход в непрерывном спектре: уровень энергии $E_{m'}$, плотность вероятности $\tilde{W}_{m'n}$, но вероятность перехода в конечный интервал энергий $W_{mn}$.)

Типична следующая задача, решаемая с помощью понятия о плотности вероятности: найти вероятность перехода между состояниями с энергиями $E_n$ и $E_m \pm \Delta E_m$, где $\Delta E_m$ — непрерывный интервал энергий (рис. 21.1). По теореме о сложении вероятностей записываем для вероятности перехода:

$$W_{mn} = \int_{E_m - \Delta E_m}^{E_m + \Delta E_m} \tilde{W}_{m'n} dE_{m'}. \tag{21.24}$$

Формула (21.24) чаще всего и применяется на практике.

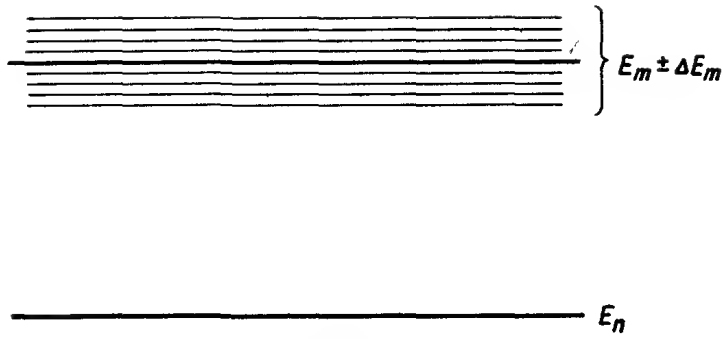



Рис. 21.1.

В природе весьма распространены действия периодического внешнего поля на квантовые системы. Таковы, например, периодические электромагнитные поля, действующие на атомы. Любое периодическое поле, да и другие переменные поля можно представить разложением по гармоническим составляющим. Наиболее же удобна для расчетов форма гармонической временной зависимости — экспоненциальная. Поэтому целесообразно, значительно не снижая общность анализа, представлять операторы возмущения в виде

$$\hat{V}(x,\ t)=V(x)\,e^{-i\omega t}, \tag{21.25}$$

где $\omega$ — частота колебаний внешнего поля.

Рассчитаем для оператора (21.25) вероятность перехода в сплошном спектре.

Предварительно вычислим вероятность перехода между уровнями $E_n$ и $E_{m'}$, считая их дискретными, т. е. применим формулу (21.20)

$$W_{m'n}=\frac{1}{\hbar^2}\,|V_{m'n}|^2\cdot\left|\int\limits_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} e^{i(\omega_{m'n}-\omega)t}dt\right|^2=\frac{1}{\hbar^2}|V_{m'n}|^2\,2\pi\tau\,\frac{\sin^2\left[\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)\right]}{\pi\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)^2}. \tag{21.26}$$

Чтобы с помощью формулы (21.26) получить плотность вероятности перехода, величину $W_{m'n}$ необходимо умножить на энергетическую плотность числа квантовых состояний $\nu$ в интервале $\Delta E_m$.

$$\rho(E)=\frac{d\nu}{dE}. \tag{21.27}$$

Ниже будет рассмотрен пример вычисления $\rho$ (см. пример 22.1), а сейчас считаем плотность $\rho$ известной, так что

$$\tilde{W}_{m'n}=\frac{1}{\hbar^2}|V_{m'n}|^2 2\pi\tau\,\frac{\sin^2\left[\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)\right]}{\pi\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)^2}\,\rho(E_{m'}). \tag{21.28}$$

Далее с помощью соотношения (21.28) по формуле (21.24) вычисляем вероятность перехода в интервал $\Delta E_m$:

$$W_{mn}=\frac{2\pi\tau}{\hbar^2}\int\limits_{E_m-\Delta E_m}^{E_m+\Delta E_m}|V_{m'n}|^2\rho(E_{m'})\frac{\sin^2\left[\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)\right]}{\pi\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)^2}dE_{m'}. \quad (21.29)$$

Последний сомножитель в выражении (21.29) можно считать аналитическим выражением δ-функции Дирака, если $\tau\gg\frac{1}{\omega}$:

$$\frac{\sin^2\left[\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)\right]}{\pi\frac{\tau}{2}(\omega_{m'n}-\omega)^2}\doteq\delta(\omega_{m'n}-\omega)=\hbar\delta(E_{m'}-E_n-h\omega).$$

После подстановки δ-функции в формулу (21.29) для вероятности перехода имеем

$$W_{mn}=\frac{2\pi\tau}{\hbar}\int\limits_{E_m-\Delta E_m}^{E_m+\Delta E_m}|V_{m'n}|^2\rho(E_{m'})\delta(E_{m'}-E_n-\hbar\omega)\,dE_{m'}. \quad (21.30)$$

Переход согласно формуле (21.30) совершается при условии

$$|E_{m'}-E_n|=\hbar\omega, \quad (21.31)$$

и тогда

$$W_{mn}=\frac{2\pi\tau}{\hbar}|V_{mn}|^2\rho(E_n\pm\hbar\omega). \quad (21.32)$$

Задача о нахождении вероятности перехода в сплошном спектре решена.

Формула (21.32) является основной при описании квантовых переходов в таких реальных системах, как атомы. Мы видим, что вероятность перехода пропорциональна времени действия возмущения. Поэтому целесообразно введение вероятности перехода в единицу времени:

$$w_{mn}=\frac{2\pi}{\hbar}|V_{mn}|^2\rho(E_n\pm\hbar\omega). \quad (21.33)$$

Если одновременно возможны переходы из состояния $n$ в любое из различных состояний $m$, то по теореме сложения вероятностей для распада состояния $n$ имеем

$$w_n=\sum_{m'}w_{mn}. \quad (21.34)$$

Важный новый момент привносится в анализ переходов формулой (21.31): при заданной частоте возмущающего поля ω совершаются не все возможные для системы переходы, а единственный, для которого разность энергий $E_n$ и $E_m$ соответствует этой формуле. Конечно, если возмущающее переменное поле раскладывается по нескольким частотам, то происходит не один, а несколько переходов $n-m$. В таком случае величинам $w_{mn}$ пропорциональны числа

соответствующих переходов в их статистическом распределении.

**21.5. Статистика процесса квантовых переходов.** В соответствии со сказанным выше о малости коэффициентов $C_k^{(1)}$ в формуле (21.8) следует заключение о применимости основных формул (21.20), (21.32), (21.33) при не слишком длительном действии возмущения. Причем нижний предел времени действия для периодических полей указан в § 21, п. 4. Это

$$\tau \gg \frac{1}{\omega}.$$

Верхний предел для $\tau$, а также физический смысл вероятности перехода в единицу времени можно выяснить, рассматривая совокупность большого числа одинаковых систем, способных к переходу под действием возмущения заданной частоты $\omega$. Так как для каждой системы возможен единственный переход, то начальное и конечное состояния фиксированы, и уместно обозначение перехода *2—1*.

Пусть вероятность перехода в единицу времени известна: она *постоянна* и равна некоторой величине $w_{2,1}$. Если число систем $N \gg 1$, то в единицу времени совершается $\eta$ переходов:

$$\eta = w_{2,1} N.$$

Отсюда следует, что $w_{2,1}$ есть *число переходов в единицу времени,* рассчитанное на одну частицу, а величина, обратная $w_{2,1}$, есть *среднее время жизни* состояния (*1* или *2*) относительно данного перехода:

$$\bar{T}_{2,1} = \frac{1}{w_{2,1}}. \tag{21.35}$$

Рассчитывая вероятность перехода за время $\bar{T}_{2,1}$, имеем

$$W_{2,1} = w_{2,1} \bar{T}_{2,1} = 1.$$

Поскольку вероятность перехода за среднее время жизни состояния достигает единицы, среднее время жизни часто называют просто временем жизни состояния (относительно конкретного перехода):

$$\bar{T}_{2,1} = T_{2,1}.$$

Время жизни состояния дает возможность судить о том, длительно или кратковременно для данной системы действие возмущения; если же $T_{2,1} \ll \tau$, где $\tau$ — время действия возмущения, то возмущение следует считать длительным. Понятно, что в таком случае приближенные формулы для вероятностей переходов (21.20), (21.32), (21.33) неверны, а критерием их применимости служит сильное неравенство

$$\frac{1}{\omega} \ll \tau \ll T. \tag{21.36}$$

Для длительно действующего возмущения ($\tau \gg T$) при расчете вероятности переходов должны быть применены иные методы. В любом случае при постоянной во времени вероятности перехода $w_{2,1}$ для

совокупности большого числа систем $N \gg 1$ пригоден экспоненциальный статистический закон переходов.

Пусть в момент времени $t$ имеется $N(t)$ одинаковых систем, находящихся в состоянии *1*. Под действием возмущения совершаются переходы в состояние *2*, и $N(t)$ убывает со временем. Задача состоит в отыскании функциональной зависимости $N(t)$.

Располагая величиной вероятности перехода в единицу времени, можно вычислить число переходов за время $dt$; это убыль числа систем в состоянии *1*:

$$dN = -w_{2,1}N(t)\,dt. \tag{21.37}$$

Решая дифференциальное уравнение (21.37), имеем

$$N = N_0 e^{-w_{2,1}t}, \tag{21.38}$$

где $N_0$ — число систем в состоянии *1* в начальный момент времени: $t=0$. Число переходов *1—2* во множестве систем к моменту времени $t$ подсчитывается по формуле

$$\eta_{2,1} = N_0(1 - e^{-w_{2,1}t}). \tag{21.39}$$

Формулы (21.38) и (21.39) и выражают статистический закон распределения переходов во времени. Необходимое для их применения условие $N \gg 1$ должно выполняться на протяжении всего времени наблюдения. Из соотношения (21.38) следует статистическое толкование времени жизни состояния $T$; это время, в течение которого число систем в первоначальном состоянии уменьшилось в $e$ раз:

$$N(T) = \frac{N_0}{e}. \tag{21.40}$$

**21.6. Квазистационарные состояния. Ширина энергетических уровней.** Обратимся теперь к анализу особенностей энергетических уровней системы, без учета возмущения находящейся в стационарных состояниях. Возмущение приводит не только к квантовым переходам между уровнями, но и к превращению их из линий в полосы конечной ширины:

$$E_m \pm \Delta E_m. \tag{21.41}$$

Более того, опыт показывает, что и при отсутствии наблюдаемого внешнего переменного поля все энергетические уровни квантовой системы, кроме основного, имеют некоторую ширину. Соответственно возбужденные состояния системы оказываются нестационарными — с течением времени система самопроизвольно переходит в основное состояние.

Переход системы под действием переменного поля называется *вынужденным*, а самопроизвольный переход — *спонтанным* (см. пример 22.2). Благодаря спонтанным переходам возбужденные состояния характеризуются определенным временем жизни. Состояние называется *квазистационарным*, если время жизни удовлетворяет неравенству

$$T_{\text{квз ст}} \gg \frac{\hbar}{E_{m'}}, \tag{21.42}$$

где $E_{m'}$ — уровень энергии квазистационарного состояния.

*Неопределенность уровня энергии и время жизни состояния связаны между собой* как для вынужденных, так и для спонтанных переходов. Найдем эту связь с точностью до порядка величин, опираясь на формулу (21.28), т. е. рассматривая вероятность перехода из состояния $E_{m'}=E_m\pm\Delta E_m$ в состояние $E_n$ в первом приближении теории возмущений за промежуток времени $T$ — время жизни состояния. (Поскольку для $\tau=T$ формула не дает точных результатов, оценка носит качественный характер.)

Выделим входящий в выражение для плотности вероятности сомножитель в виде

$$\frac{\sin^2\left[\frac{T}{2}(\omega_{mn}-\omega)\right]}{\left[\frac{T}{2}(\omega_{mn}-\omega)\right]^2}. \tag{21.43}$$

Он представляет собой известную функцию $\frac{\sin^2\alpha}{\alpha^2}$, свойства которой нами рассматривались ранее, в § 4. В частности, функция заметно отличается от нуля в интервале $-\pi<\alpha<\pi$, от которого согласно формуле (21.41) следует взять половину. Чтобы вероятность перехода $m-n$ была существенно отличной от нуля, плотность вероятности должна быть отлична от нуля, а следовательно, изменение аргумента функции (21.43) должно удовлетворять равенству

$$\frac{T}{2\hbar}\Delta E_m=\pi.$$

Учитывая еще дополнительные максимумы функции $\frac{\sin^2\alpha}{\alpha^2}$ за пределами взятого интервала, окончательно имеем равенство-неравенство

$$\Delta E_m T\geqslant 2\pi\hbar. \tag{21.44}$$

Соотношение между неопределенностью энергии и временем жизни нестационарного состояния называется соотношением неопределенностей для энергии и времени. Оно имеет очень общий характер, т. е. применимо в случае любых взаимодействий, вызывающих нестационарное состояние разнообразных квантовых систем, для квазистационарных состояний со спонтанными переходами.

Соотношение неопределенностей обосновывалось и интерпретировалось выше, в § 4. Приведенный сейчас вывод в большей степени, нежели предыдущий, соответствует природе закономерности. Из него непосредственно вытекает, что $T$ не является неопределенностью при измерении времени $t$, а есть время жизни нестационарного состояния. Если же соотношение применяется для объяснения результатов измерения энергии, то $T$ — время действия возму-

щения, вносимого измерительным прибором в стационарное состояние изучаемой системы, т. е. время измерения.

Проясняется и динамическая причина неопределенности энергии: внешнее окружение системы сообщает ей некоторую порцию энергии. Узнать величину переданной энергии заранее нельзя, так как квантовые переходы носят случайный характер.

В любом случае чем больше внешнее воздействие на систему, тем больше передаваемая энергия и меньше время жизни состояния. Наоборот, системы, изолированные от внешних воздействий и подверженные только спонтанным переходам, имеют относительно большое время жизни своих состояний. Такие состояния и называют квазистационарными. Условие (21.42) для них с помощью неравенства (21.44) дает $\Delta E_m \ll E_m$; только в этом случае имеет смысл говорить о дискретном состоянии.

Спонтанный переход из квазистационарных состояний в стационарные для большого числа систем может описываться законом распада (21.38), (21.39). Справедлива и формула (21.40) Кроме спонтанных переходов, характерных для атомов и молекул, спонтанный распад имеет место для атомных ядер, нестабильных элементарных частиц и подчиняется рассмотренным выше для квантовых систем статистическим закономерностям.

## § 22. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ВОЛНАМИ

**22.1. Вероятность перехода атома из одного стационарного состояния в другое под действием электромагнитных волн.** Полная и последовательная теория испускания и поглощения света атомами громоздка в математическом отношении. В рамках данного курса ограничимся рассмотрением отдельных важных вопросов.

Пусть уединенный атом находится в области пространства, где действует плоская монохроматическая электромагнитная волна. Воздействие на электрон в атоме электрического поля волны, которое в данном случае на несколько порядков больше, чем магнитное, но много меньше собственного поля атома, можно считать возмущением. С классической точки зрения к электрону приложена сила:

$$\vec{F} = -e\vec{\mathscr{E}}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\omega t}.$$

Совместим начало координат с ядром атома, считая последнее неподвижным. Для видимого света длина волны значительно больше размеров атома, поэтому $|\vec{k}\vec{r}| \sim \frac{a}{\lambda} \ll 1$ и можно взять $e^{i\vec{k}\vec{r}} \simeq 1$ для любого положения электрона в атоме. В этом *длинноволновом* приближении

$$\vec{F} = -e\vec{\mathscr{E}}_0 e^{-i\omega t}$$

Располагая выражением силы, найдем вид оператора возмущения как потенциальную энергию частицы во внешнем поле:

$$\hat{V} = e\vec{\mathscr{E}}_0\vec{r}e^{-i\omega t}.$$

Если ввести еще единичный вектор поляризации волны $\vec{q}$, то получим

$$\hat{V} = e\mathscr{E}_0(\vec{q}\vec{r})e^{-i\omega t}. \tag{22.1}$$

Теперь можно по формуле (21.7а) записать матричные элементы оператора возмущения:

$$V_{mn} = \int \psi_m^* e\mathscr{E}_0\vec{q}\vec{r}e^{-i\omega t}\psi_n dx. \tag{22.2}$$

Индексы $n$ и $m$ обозначают совокупность квантовых чисел, задающих начальное и конечное состояния электрона.

Волновые функции, описывающие стационарные состояния электрона в атоме, известны (см. формулу (11.21)). Это позволяет в принципе вычислить матричные элементы $V_{mn}$.

В интеграле (22.1) $\mathscr{E}_0$ и $\vec{q}$ — постоянные величины.

Величину

$$\vec{p}_{mn} = e\int \psi_m^*\vec{r}\psi_n dx$$

называют дипольным моментом перехода. Вводя его в формулу (22.1), матричный элемент $V_{mn}$ запишем в виде

$$V_{mn} = \mathscr{E}_0\vec{q}\vec{p}_{mn}e^{-i\omega t}. \tag{22.3}$$

Оператор возмущения найден, теперь согласно формуле (21.20) вычислим вероятность перехода:

$$W_{mn} = \frac{1}{\hbar^2}\mathscr{E}_0^2|\vec{q}\vec{p}_{mn}|^2\left|\int\limits_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}dt\right|^2. \tag{22.4}$$

Из формулы (22.4) следует, что вероятность перехода пропорциональна квадрату амплитуды волны Следовательно, она пропорциональна интенсивности падающего излучения. Кроме того, существенны начальное и конечное состояния электрона, направление поляризации и частота электромагнитной волны. Ниже произведем более подробный анализ особенностей испускания (поглощения) света, пользуясь формулой (22.4) и материалом предыдущего параграфа

Энергетические уровни атома представляют собой в соответствии со сказанным ранее и формулой (21.41) полосы шириной $2\Delta E_m$ Так что речь идет о переходах из интервала $\Delta E_n$ в интервал $\Delta E_m$, внутри которых энергия принимает непрерывные значения. Учитывая это, заключаем, что для расчета вероятности перехода надо иметь энергетическую плотность числа состояний (см. определение (21.27)). Отложим расчет $\rho$ до примера 22.1, так как абсо-

лютное значение вероятности перехода нам не потребуется, а будут исследоваться входящие в выражение сомножители помимо ρ. Будем пользоваться для переходов атома формулами (21.32) и (21.33). Наконец, упрощаем задачу, рассматривая переход между дискретным уровнем $E_n$ и полосой $E_m \pm \Delta E_m$.

Итак,

$$W_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \mathscr{E}_0^2 |\vec{q}\vec{p}_{mn}|^2 \rho(E) \tau, \tag{22.5}$$

причем

$$|E_{m'} - E_n| = \hbar\omega. \tag{22.6}$$

Вероятность перехода в единицу времени выражается формулой

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \mathscr{E}_0^2 |\vec{q}\vec{p}_{mn}|^2 \rho(E). \tag{22.7}$$

Формулы (22.5), (22.6) и (22.7) являются исходными при решении большинства практических задач на излучение и поглощение света. Из них вытекает первый существенный вывод: излучается и поглощается лишь волна, частота которой удовлетворяет условию резонанса (22.6):

$$\omega = \omega_{m'n}, \tag{22.8}$$

т е. частота волны, возмущающей состояние атома, должна быть равна частоте перехода.

Мы помним, что в атоме одному и тому же энергетическому уровню обычно соответствует несколько функций состояния; уровень вырожден с некоторой кратностью. В формулах для вероятности переходов это обстоятельство учитывается при подсчете плотности числа состояний ρ, ибо берется число состояний $d\nu$, приходящихся на интервал энергии $dE$.

**22.2. Правила отбора для испускания и поглощения света атомами.** Обратимся сейчас к параметрам самого атома и рассмотрим, как от них зависит вероятность перехода. Для этого надо исследовать выражение, входящее сомножителем в формулы вероятности перехода (22.5), (22.7):

$$\vec{q}\vec{p}_{mn} = e \int \psi_m^* (\vec{q}\vec{r}) \psi_n dV. \tag{22.9}$$

Можно считать, что электрон в атоме находится в центрально-симметричном стационарном поле. Поэтому функция состояния распадается на угловой и радиальный сомножители, причем угловая часть выражается известными сферическими функциями $Y_{lm}(\Theta, \psi)$ (см. § 10).

Пусть свет, вынуждающий переход, поляризован по оси $Oz$ так, что $\vec{q}\vec{r} = z$. Тогда, переходя в формуле (22.9) к более подробной записи индексов, имеем

$$\vec{q}\vec{p}_{mn} = e \int R_{n_2} Y^*_{l_2 m_2} z R_{n_1} Y_{l_1 m_1} r^2 \sin\Theta dr d\Theta d\psi. \tag{22.10}$$

Используя одну из формул (10.11), выполним подстановку $z = r\cos\Theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{10}$ в последнее равенство:

$$\vec{q}\vec{p}_{mn} = e\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty R_{n_2} R_{n_1} r^3 dr \int_0^{4\pi} Y^*_{l_2 m_2} Y_{l_1 m_1} Y_{10} d\Omega. \qquad (22.11)$$

В теории сферических функций доказывается, что

$$Y_{10} Y_{lm} = A Y_{l+1,m} + B Y_{l-1,m}$$
$$(A,\ B = \text{const}).$$

Поэтому интеграл по угловым переменным $\Theta$ и $\varphi$ в выражении (22.11) можно представить как сумму двух слагаемых:

$$A \int_0^{4\pi} Y^*_{l_2 m_2} Y_{l_1+1,\, m_1} d\Omega + B \int_0^{4\pi} Y_{l_2 m_2} Y_{l_1-1,\, m_1} d\Omega.$$

Вследствие ортогональности сферических функций разных индексов он отличен от нуля лишь при условиях $l_2 - l_1 = \pm 1$, $m_2 - m_1 = 0$. Только при этих условиях отлична от нуля и вероятность перехода $W_{2,1}$.

Итак, под действием света, поляризованного по оси $Oz$, осуществляются только те переходы, которые удовлетворяют *правилам отбора*: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$.

Если свет распространяется вдоль оси $Oz$, то возможны два независимых направления поляризации, при которых $\vec{q}\vec{r} = x$ и $\vec{q}\vec{r} = y$. Вместо раздельного анализа этих двух случаев удобно рассмотреть линейные комбинации $\vec{q}\vec{r} = x \pm iy$. Они соответствуют круговой поляризации света в плоскости $xOy$ с направлением вращения по часовой стрелке и против него.

В сферических координатах $x \pm iy = r \sin\Theta e^{\pm i\varphi}$, откуда с помощью соответствующей формулы (10.11) получаем

$$x + iy = r\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, Y_{1,-1}, \qquad x - iy = r\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, Y_{1,1}.$$

Выражение для $\vec{q}\vec{p}_{mn}$ состоит теперь из двух слагаемых, содержащих сомножители типа

$$\int_0^{4\pi} Y^*_{l_2 m_2} Y_{l_1 m_1} Y_{1,\pm 1} d\Omega.$$

Используя формулу для сферических функций

$$Y_{1,1} Y_{lm} = C Y_{l+1,\, m+1} + D Y_{l-1,\, m-1},$$

получим правила отбора для круговой поляризации света: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = \pm 1$.

Соединяя оба выведенных правила вместе, видим, что при произвольной ориентации вектора $\vec{q}$ возможны переходы с изменением квантовых чисел стационарных состояний согласно условиям $\Delta l = \pm 1$ и $\Delta m = 0, \pm 1$. Все другие переходы запрещены. Однако необходимо учесть, что было рассмотрено первое приближение теории возмущений, т. е. исходная формула была приближенной. Кроме того,

не принимались во внимание магнитные взаимодействия электрона с волной, поэтому указанное правило не является абсолютным. Оно справедливо только для так называемых *электрических дипольных переходов*. Однако вероятности всех других типов переходов обычно очень малы. Поэтому линии спектра, связанные с запрещенными переходами, имеют весьма малую интенсивность.

Проследим также, какую роль играет в процессах излучения спин электрона. В рассмотренных выше электрических переходах магнитные взаимодействия не учитывались и оператор возмущения не действовал на спиновую часть полной волновой функции электрона (13.18). Поэтому она до сих пор и не учитывалась. Если принять во внимание спиновые функции, то при вычислении $\vec{q}\vec{p}_{mn}$ получаем с помощью (22.9)

$$\vec{q}\vec{p}_{mn}=e\int\psi_m^*\vec{q}\vec{r}\psi_n dx u^+(m_{s_2})\,u(m_{s_1}).$$

Так как спиновые функции $u(m_s)$ ортонормированы, то

$$u^+(m_{s_2})\,u(m_{s_1})=\begin{cases}1, & m_{s_2}=m_{s_1},\\ 0, & m_{s_2}\neq m_{s_1}.\end{cases}$$

Это означает, что разрешены переходы, при которых направление спина не изменяется. Понятно, что при учете магнитных взаимодействий обнаружится возможность переходов с «опрокидыванием» спина.

В нашем курсе нет возможности рассматривать правила отбора при магнитных взаимодействиях, при излучении света сложными атомами и ряд других смежных вопросов. Укажем только, что во всех случаях появление правил отбора связано с симметрией волновых функций и оператора возмущения. Для уяснения существа дела рассмотрим пример. Если в интеграле (22.9) функции $\psi_m$ и $\psi_n$ обе четны или обе нечетны, то подынтегральное выражение в целом нечетно. Так как интегрирование совершается по всему пространству, то интеграл от нечетной функции равен нулю. Поэтому переходы данного типа возможны только между состояниями разной четности, а четность состояния электрона в атоме определяется четностью числа $l$. Таков общий смысл правила отбора: $\Delta l=\pm 1$.

В конечном итоге многие процессы взаимодействия между частицами или системами частиц могут быть сведены к кваитовым переходам. Поэтому исследование правил отбора дает весьма важные сведения о характере явлений в микромире. С этой целью в кваитовой теории используется математический аппарат теории групп.

**22.3. Проявление законов сохранения при излучении света.** Обсуждение следствий, к которым приводят законы сохранения универсальных физических величин при излучении и поглощении света свободными атомами, удобно вести с учетом корпускулярных свойств электромагнитного излучения. В замкнутой системе, состоящей из атома и фотона, должны сохраняться энергия, импульс, момент импульса и четность.

Приведенное выше условие резонанса (22.6) является ничем иным, как выражением закона сохранения энергии в системе атом — фотон: энергия фотона равна разности уровней энергии атома:

$$\hbar\omega=|E_m-E_n|.$$

Сохранение импульса не отражено в наших расчетах, но известно, что импульс замкнутой системы строго сохраняется. Сохранение импульса приводит к тому, что атом получает отдачу в направлении, противоположном движению испущенного фотона. При поглоще-

нии света ранее неподвижный свободный атом получает импульс $\frac{\hbar\omega}{c}$ и приходит в движение.

Уместно заметить, что вследствие этого часть энергии $|E_m - E_n|$ сообщается атому в виде кинетической. Отсюда следует, что фактически излучается квант с энергией и частотой, несколько меньшими, нежели в формуле (22.6). По этой причине «резонанс» излучения свободных атомов и поглощения таких же атомов, вообще говоря, расстраивается, т. е. кванты, испущенные свободными атомами, не поглощаются теми же атомами в невозбужденном состоянии. Явление существенно для «крупных» квантов — $\gamma$-излучения ядер. (Известный эффект Мессбауэра состоит в том, что при низких температурах ядра атомов твердого тела излучают без отдачи.)

Используя закон сохранения момента импульса и правила отбора, можно сделать заключение о величине проекции момента импульса фотона на направление его движения. Если свет поляризован в плоскости $xOy$, то он распространяется вдоль оси $Oz$. При излучении фотона проекция момента импульса атома на ось $Oz$ изменяется на величину $\pm\hbar$. Следовательно, такими же целочисленными значениями проекции момента обладает фотон. На этом основании не совсем точно говорят, что фотон обладает целым спином, равным единице. Дополнительный анализ показывает, что в отличие от обычных частиц спин фотона имеет только две, а не три различные проекции момента импульса. Проекцию момента импульса фотона на направление движения называют спиральностью, она принимает значения $\pm\hbar$.

Четность квантовой системы является мультипликативной величиной. Для электрона в центральном поле четность состояния равна $(-1)^l$. На основании правила отбора $\Delta l = \pm 1$ делаем вывод, что фотоны электрического дипольного излучения суть частицы нечетные, т. е. их внутренняя четность равна $-1$. Можно показать, что фотоны, излучение которых происходит при магнитных взаимодействиях только за счет опрокидывания спина и без изменения квантового числа $l$, являются четными. Отсюда видно, что фотоны характеризуются различной четностью и спиральностью.

**22.4. Квантование электромагнитного поля.** Выше в курсе квантовой механики не раз говорилось, что электромагнитная волна может рассматриваться как совокупность квантов энергии — фотонов. Такая ее трактовка начинается с гипотезы Планка — Эйнштейна, а в теории Бора получает обоснование: при переходе атома из одного стационарного состояния в другое в соответствии с законом сохранения энергии излучается или поглощается фотон. Напомним, что рассчитанные теоретически частоты излучения для атома водорода с высокой точностью совпадают с измеренными на опыте, т. е. гипотеза о квантах электромагнитного поля подтверждается спектроскопическими наблюдениями. Убедительным свидетельством в пользу предположения о существовании квантов служит эффект Комптона и ряд других опытов и явлений.

Но в рамках развитой в курсе ранее последовательной кванто-

во-механической теории строения атома понятие о кванте электромагнитного поля остается на уровне гипотез, дополненных положениями § 22, п. 3 о четности и спиральности. Для нерелятивистской квантовой теории характерно, что при описании излучения и поглощения света атомом электромагнитное поле, взаимодействие которого с атомом вызывает излучение и поглощение, рассматривается как *непрерывное силовое поле*, а квантовый характер его не учитывается. (Достаточно вспомнить вид оператора $\widehat{V}$ в предыдущих параграфах.) В то же время теория приводит к скачкообразным, т. е. квантовым, изменениям энергии, импульса, момента импульса и четности первоначального состояния излучающего атома.

Анализ взаимодействия квантовой системы — атома — с непрерывным полем не является до конца последовательным, как не является исчерпывающей и нерелятивистская теория излучения, элементы которой мы изложили выше. В более последовательной теории — квантовой электродинамике — поле и *до*, и *после* взаимодействия с атомом рассматривается как совокупность квантов. Здесь применяется специальная математическая процедура, переводящая непрерывное классическое поле в квантовое. Она носит название вторичного квантования. Сейчас мы ограничимся нестрогими, но зато наглядными рассуждениями, дополняя теорию квантовых переходов представлением об электромагнитных волнах как совокупности квантов.

Подведем итог сведениям о фотонах — квантах электромагнитного поля, полученным выше. Условие перехода (22.6) может трактоваться как формула для энергии фотона:

$$\varepsilon = \hbar\omega.$$

Правила отбора, соединенные с законами сохранения момента импульса (см. § 22, п. 4), приводят к спиральности фотона, принимающей два значения: $\pm\hbar$ — и соответствующей правой и левой круговым поляризациям гармонической составляющей макроскопического электромагнитного поля. То же относится к четности: фотоны могут иметь четность $+1$ и $-1$. Что касается импульса фотона, то заключение о его наличии и величине можно получить из общей формулы СТО о связи энергии и импульса:

$$p = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k,$$

где $k$ — волновое число.

Теперь произведем квантование свободного электромагнитного поля с помощью следующего весьма общего подхода. Поле в некотором объеме может быть представлено как совокупность монохроматических волн всевозможных частот — гармонических составляющих (см. ч. III, § 9). Каждая из них имеет определенную частоту $\omega_i$ и одну из двух возможных независимых поляризаций. Гармоники при квантовании рассматриваются как квантовые осцилляторы (см. § 6) с частотой $\omega_i$ и энергией стационарных состояний:

$$E_i = \hbar\omega_i n_i + \frac{\hbar\omega_i}{2}.$$

*Возбуждения гармоники-осциллятора и есть кванты электромагнитного поля, или фотоны.* Число фотонов определенной частоты $\omega_i$ равно квантовому числу для данного осциллятора $n_i$. Энергия нулевых колебаний $\frac{\hbar\omega_i}{2}$ входит в общую энергию гармоники и соответствует невозбужденному состоянию осциллятора, а в макроскопических проявлениях — нулевой напряженности поля для данной гармоники.

Энергия поля складывается из энергий гармоник-осцилляторов. С учетом двух независимых поляризаций монохроматических составляющих и запишем энергию электромагнитных волн в виде суммы энергии квантов:

$$E = \sum_i \left(\hbar\omega_i n_i^{(1)} + \frac{\hbar\omega_i}{2} + \hbar\omega_i n_i^{(2)} + \frac{\hbar\omega_i}{2}\right) = \sum_i (\hbar\omega_i N_i + \hbar\omega_i). \quad (22.12)$$

Сюда входит и энергия нулевых колебаний. Подчеркнем, что $N_i$ — число квантов с частотой $\omega_i$ и двумя значениями спиральности. На одну независимую поляризацию гармоники приходится число фотонов $\frac{N_i}{2}$.

Пример 22.1. **Расчет вероятности переходов в системе атом — фотоны.** Рассмотрим процесс излучения и поглощения света с учетом квантовой природы электромагнитных волн. Основой для всех дальнейших расчетов послужит формула (22.7)

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \mathscr{E}_0^2 |\vec{q}\vec{p}_{mn}|^2 \rho,$$

выражающая вероятность перехода $n \to m$ в единицу времени. Эту величину можно истолковать и как число переходов в единицу времени, и как число испущенных или поглощенных фотонов с энергией $\hbar\omega_{mn}$. (Разумеется, это статистическая трактовка, т. е. применима она к большому числу атомов.)

Перейдем от напряженности поля к числу фотонов, взаимодействующих с атомом, для чего воспользуемся формулой плотности энергии электромагнитной волны (см. ч. III, (9.12)). Необходимо также учесть, что в оператор возмущения (22.1) входит постоянное — амплитудное — значение электрической напряженности $\mathscr{E}_0$. При расчете соответствующего числа фотонов поле по условиям длинноволнового приближения (см. § 22, п. 1) следует считать имеющим напряженность $\mathscr{E} = \mathscr{E}_0$. Кроме того, каждой частоте $\omega$ соответствуют две гармоники с независимыми поляризациями.

Итак,

$$\frac{\mathscr{E}_0^2}{4\pi\varkappa} V = \frac{\hbar\omega N}{2},$$

где $\varkappa = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$ — сокращенное обозначение константы, входящей в закон Кулона; $\mathscr{E}_0$ — амплитуда напряженности. Отсюда находим число фотонов, соответствующих резонансной частоте $\omega = \omega_{mn}$:

$$N = \frac{\mathscr{E}_0^2 V}{2\pi\varkappa\hbar\omega}. \quad (22.13)$$

Энергия нулевых колебаний $\hbar\omega$ в расчет не принималась, так как при $N = 0$

считаем $\mathscr{E}_0 = 0$. Однако это слагаемое играет важную роль при анализе микропроцессов излучения и поглощения света, о чем речь пойдет ниже. Область локализации фотонов определяется длинами их волн, т. е. объем $V$, входящий в формулу (22.13), равен $\lambda^3$, и он много больше размеров атома в соответствии с длинноволновым приближением.

С помощью формулы (22.13) вместо (22.7) для вероятности перехода имеем

$$w_{mn} = 4\pi^2 \varkappa \frac{N}{V} \omega \, |\vec{q}\vec{p}_{mn}|^2 \rho \, . \tag{22.14}$$

Далее применим эту формулу к излучению. После перехода имеется система, состоящая из атома с энергией $E_m$, внешних фотонов числом $N$ и одного излученного фотона $\hbar\omega_{mn}$.

В соответствии с положениями § 21, п. 4 необходимо учесть при применении формулы (22.14) плотность числа конечных состояний системы в малом интервале энергии около ее значения $E_m$, в который произошел переход.

Применим соотношения неопределенностей Гейзенберга для координат и импульса (4.8). Записывая их как приближенные равенства

$$\Delta x \Delta p_x = 2\pi\hbar,$$
$$\Delta y \Delta p_y = 2\pi\hbar,$$
$$\Delta z \Delta p_z = 2\pi\hbar,$$

и перемножая почленно, имеем

$$\Delta V \Delta p = (2\pi\hbar)^3,$$

где $\Delta V$ есть объем обычного пространства, в котором находится частица; $\Delta p$ — объем пространства импульсов. В таком случае $(2\pi\hbar)^3$ можно истолковывать как минимальный объем «клетки» в фазовом пространстве координат и импульсов, соответствующей одной частице.

Для излученного фотона объем фазового пространства составляет $Vp^2 dp d\Omega$, где $dp$ соответствует интервалу энергий $dE$, а элемент телесного угла взят в направлении излучаемой гармоники (см. рис. 22.1). Упрощая записи, все величины рассчитываем на единицу телесного угла, т. е. далее в формулы $d\Omega$ не входит.

На один излученный фотон приходится, таким образом, столько состояний, сколько раз клетка $(2\pi\hbar)^3$ укладывается в фазовом объеме:

$$d\nu = \frac{Vp^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V\varepsilon^2 d\varepsilon}{c^3 (2\pi\hbar)^3} \, .$$

Отсюда

$$\rho = \frac{d\nu}{d\varepsilon} = \frac{V\varepsilon^2}{c^3 (2\pi\hbar)^3} \, . \tag{22.15}$$

Вставляя величину $\rho$ из формулы (22.15) в формулу (22.14), получаем выраже-

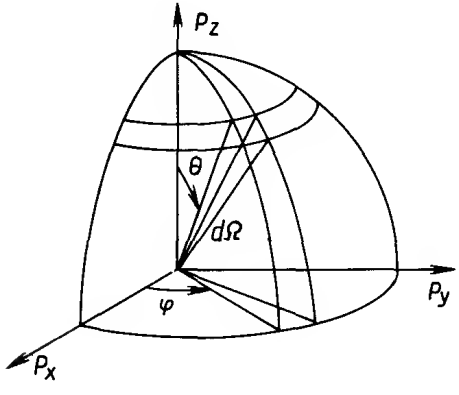



Рис. 22.1.

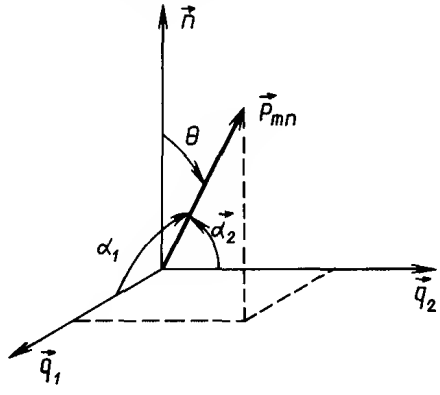



Рис. 22.2.

ние для вероятности излучения в одну секунду фотона по определенному направлению в пространстве и с определенной поляризацией:

$$w_{mn}=\frac{\varkappa N w^3}{2\pi\hbar c^3}\,|\vec{q}\vec{p}_{mn}|^2. \tag{22.16}$$

Просуммируем искомую величину по двум независимым направлениям поляризации. Согласно рисунку 22.2 имеем

$$p_{mn}^2\sin^2\Theta=p_{mn}^2\cos^2\alpha_1+p_{mn}^2\cos^2\alpha_2=(\vec{q}_1\vec{p}_{mn})^2+(\vec{q}_2\vec{p}_{mn})^2,$$

где $\Theta$ есть угол между вектором $\vec{p}$ и лучом. Следовательно,

$$w_{mn}=\frac{\varkappa N\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\,|\vec{p}_{mn}|^2\sin^2\Theta. \tag{22.17}$$

Для многих приложений от (22.17) нужно перейти к вероятности излучения атома по всем направлениям в пространстве. Вводя элемент телесного угла, интегрируем выражение (22.17) по всем направлениям:

$$P_{mn}=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{\varkappa N\omega^3}{2\pi c^3\hbar}\,|\vec{p}_{mn}|^2\sin^2\Theta\sin\Theta d\Theta d\varphi.$$

После вычислений

$$P_{mn}=\frac{4\varkappa\omega^3 N}{3c^3\hbar}\,|\vec{p}_{mn}|^2. \tag{22.18}$$

Таковы результаты расчетов основных параметров излучения с учетом квантового характера поля. Они целиком переносятся на поглощение фотонов атомами; в силу принципа микроскопической обратимости все формулы для вероятностей излучения справедливы и для поглощения. Подчеркнем также, что рассматривалось излучение под действием внешнего поля. Такое излучение называется вынужденным или индуцированным.

В заключение вопроса оценим порядок величин, к которым приводит теория. Считая $|\vec{p}_{mn}|=ea$, где $a$ — линейные размеры атома, получаем для взаимодействия с одним фотоном ($N=1$):

$$P_{mn}\simeq\frac{\varkappa e^2}{\hbar c}\,\omega_{mn}\left(\frac{\omega_{mn}a}{c}\right)^2\simeq\frac{\omega_{mn}}{137}\left(\frac{\omega_{mn}a}{c}\right)^2.$$

Так как для атомов $a\sim\dfrac{\varkappa e^2}{\hbar\omega_{mn}}$, то окончательно

$$P_{mn}\sim\frac{\omega_{mn}}{(137)^3}\ .$$

Для оптических частот получается $P_{mn}\sim 10^9\ \text{с}^{-1}$, т. е. время жизни состояния при наличии внешнего поля составляет $10^{-9}$ с. Вероятность излучения растет с частотой и зависит от плотности энергии соответствующей гармоники внешнего поля — от числа фотонов $N$.

Сравнивая вероятности различных переходов $n\to m$, можно понять, что интенсивность линий в спектрах при прочих равных условиях определяется входящей в формулу (22.18) величиной $|\vec{p}_{mn}|$.

Пример 22.2. **Расчет вероятности спонтанных переходов.**

Кроме вынужденных или индуцированных переходов, рассмотренных в предыдущем примере, у атомов имеют место спонтанные переходы (см. § 21, п. 6). Если переход совершается в состояние с большей энергией, то система поглощает, уменьшая число фотонов в поле (как правило, имеют место однофотонные процессы, т. е. число фотонов в одном акте поглощения уменьшается на единицу). Понятно, что при отсутствии передачи атому энергии от внешнего поля поглощение исключено законом сохранения энергии. Иное положение складывается при излучении: атом

переходит из высшего энергетического состояния в низшее, при этом рождение фотона не запрещено законом сохранения энергии.

Уравнение Шредингера привело нас еще в начале курса к стационарным состояниям. Атом как система из ядра и электронов, связанных внутренними силами, может находиться в состояниях с определенной энергией, не изменяющейся с течением времени. Состояния сохраняются до тех пор, пока не появляется внешнее переменное поле, вызывающее квантовые переходы. Это значит, что атом в возбужденном состоянии без внешнего воздействия излучать не должен, несмотря на энергетическую возможность перехода с излучением.

Однако реальное положение дел иное. Атом в возбужденных состояниях пребывает сравнительно малое время. Для переходов, соответствующих видимой части спектра, время жизни возбужденных состояний изолированного атома составляет $10^{-8}-10^{-9}$ с. Излучение при нулевой напряженности внешнего поля существует. Это спонтанное излучение. Произведем для него расчеты, опираясь на следующие наглядные, но нестрогие положения.

При $\mathscr{E}_0=0$ энергия поля согласно формуле (22.12) нулю не равна, а эквивалентна энергии одного фотона $\hbar\omega$ на две гармоники одной частоты, но разных поляризаций. Это значит, что имеется вероятность испускания фотона по любому направлению, определяемая формулой (22.18) при $N=1$:

$$P_{mn}=\frac{4\varkappa\omega_{mn}^3}{3c^3\hbar}\,|\vec{p}_{mn}|^2. \tag{22.19}$$

Итак, вероятность спонтанных переходов из всех возбужденных состояний в основные или нижележащие по энергии (в единицу времени) отлична от нуля, т. е. все эти состояния квазистационарны, а спонтанный переход можно трактовать как распад квазистационарного состояния. Время жизни квазистационарных состояний определяется формулой (21.35)

$$\tau_{mn}=\frac{1}{P_{mn}}, \tag{22.20}$$

ширина уровня энергии — формулой (21.44)

$$\Delta E_m=\frac{2\pi\hbar}{\tau_{mn}};$$

она называется *естественной* шириной.

Во множестве атомов, находящихся в одном и том же возбужденном состоянии, «высвечивание» происходит с течением времени согласно формулам (21.38) и (21.39); к моменту времени $t$ испущено фотонов:

$$\eta_{mn}=N_n(0)\,(1-e^{-P_{mn}t}). \tag{22.21}$$

Наконец, если $\mathscr{E}_0\neq 0$ и, кроме спонтанного, происходит вынужденное излучение, то вероятность перехода увеличивается, время жизни сокращается, уровень энергии расширяется.

## Методические указания и рекомендации

**1.** В принципиальном отношении седьмая глава исключительно важна: в ней рассматривается эволюция систем микрочастиц с течением времени. Между тем основное внимание и учебное время обычно приходится уделять стационарным состояниям, своеобразной статике микромира.

Как известно, понятия о квантовых переходах, квантовых «скачках» широко применяется в квантовой физике и встречается в учебной и методической литературе. Нам представляется существенным выяснить вероятностный характер отдельного перехода и связать его со статистической интерпретацией проявления в большом числе

переходов (§ 21, п. 5). Между тем если преподавателем обычно прилагаются значительные усилия при вероятностной трактовке ψ-функции, то гораздо более трудное для усвоения понятие о вероятности перехода в наших кратких курсах почти не интерпретируется.

Особенно благоприятные условия возникают для трактовки соотношения неопределенностей энергия-время, если вывести его в процессе анализа нестационарного состояния (§ 21, п. 6). Наконец, изучение природы и характеристик самого квазистационарного состояния существенно для изучения далее физики ядра и элементарных частиц.

Прикладной вопрос, для которого развита и на котором конкретизируется в главе теория изменения состояния квантовой системы с течением времени,— это излучение и поглощение света атомами. Рамки курса и подготовка студентов позволяют выяснить лишь качественные стороны явлений. Лектор, как правило, встает перед необходимостью ограничиться малым именно тогда, когда только и открываются возможности для раскрытия многих важных и интересных вопросов. Поэтому мы снабдили главу материалами, преподнесенными в элементарном изложении, но касающимися принципиально важных общих вопросов квантовой физики. Это § 21, пп. 4, 5, 6; примеры 22.1, 22.2, которые можно осветить как на лекциях, так и использовать для дополнительного чтения, докладов на семинарских занятиях и т. д.

**II.** При чтении главы студентам полезно обратить внимание на вопросы, выполнить упражнения, обсудить новые положения

— Назовите встречающиеся ранее в курсе положения об изменении состояния микросистем. Сформулируйте постулат Бора о переходах квантовой системы из одного состояния в другое. Проанализируйте характер зависимости от времени ψ-функции системы в стационарном состоянии, влияние этого изменения на измеримые величины, характеризующие состояние. Обдумайте постановку вопроса об изменении состояния на основе уравнения Шредингера. С качественной стороны проследите за решением вопроса об изменении состояния в теории нестационарных возмущений. Проанализируйте зависимость вероятности перехода от параметров внешнего поля и системы. То же выполните для конкретного случая взаимодействия электромагнитной волны с атомом. Установите связь законов сохранения с процессом излучения и поглощения света атомом, с его основными закономерностями, выясненными при квантово-механическом решении задачи об излучении. Выполните упражнения к главе.

### Упражнение VII

**1.** Частица с массой $\mu$ и зарядом $e$ находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. На частицу действует однородное электрическое поле, изменяющееся по закону

$$\vec{\mathscr{E}} = \vec{\mathscr{E}}_0 \frac{1}{\tau\sqrt{\pi}} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Составьте выражение для оператора возмущения, вызывающего переход из одного стационарного состояния в другое. Найдите условия максимума и минимума излучения.

Ответ.

$$\hat{V} = -\frac{e\vec{r}\vec{\mathscr{E}}_0}{\tau\sqrt{\pi}} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Максимум излучения наблюдается при условии, что вектор $\vec{\mathscr{E}}_0$ направлен по оси $Ox$, вдоль которой движется частица.

**2.** По условию задачи 1 вычислите вероятность перехода между различными состояниями.

Решение.

Пусть вектор $\vec{\mathscr{E}}_0$ направлен по оси $Ox$. Волновые функции стационарных состояний были найдены ранее, в § 5, п. 2. Матричный элемент для оператора перехода равен $V_{mn}$:

$$V_{mn} = -\frac{ea\mathscr{E}_0}{\pi^2\tau\sqrt{\pi}} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \left\{ \frac{1}{(n-m)^2} \cos\frac{\pi x}{a}(n-m) - \frac{1}{(n+m)^2} \cos\frac{\pi x}{a}(n+m) \right\} \Big|_0^a.$$

Видно, что матричный элемент равен нулю, если разность $n-m$ четна. Рассмотрим переход 1—2:

$$V_{2,1} = \frac{16}{9} \frac{ea\mathscr{E}_0}{\pi^{\frac{5}{2}}\tau} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Вероятность перехода находится по формуле (21.20)

$$W_{2,1} = \frac{256}{81} \frac{e^2a^2\mathscr{E}_0^2}{\hbar^2\pi^5\tau^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{2,1}t} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} dt \right|^2.$$

Вычисляя интеграл под знаком модуля, получаем

$$\tau\sqrt{\pi} e^{-\frac{1}{4}\omega_{2,1}^2\tau^2},$$

поэтому окончательно

$$W_{2,1} = \frac{256}{81} \frac{e^2a^2\mathscr{E}_0^2}{\hbar^2\pi^4} e^{-\frac{\omega_{2,1}^2\tau^2}{2}}.$$

**3.** Рассчитайте дипольный момент перехода атома водорода из состояния $1s$ в состояние $2p$ (при $m=0$).

Решение.

$$\vec{p}_{2p,\ 1s} = e\int \psi_{2p}^* \vec{r} \psi_{1s} dV = e\left[\vec{i}\int \psi_{2p}^* x\psi_{1s} dV + \vec{j}\int \psi_{2p}^* y\psi_{1s} dV + \vec{k}\int \psi_{2p}^* z\psi_{1s} dz\right].$$

Произведя подстановку функций состояния:

$$\psi_{2p} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\Theta \frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}}, \quad \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\rho}.$$

(см. формулы (11.21), (11.11), (10.11)) и учитывая, что $\rho=\frac{r}{a}$, вычислим интегралы при векторах $\vec{i}$, $\vec{j}$ и $\vec{k}$, начиная с интегрирования по угловым переменным.

Ответ. $\vec{p}_{2p,\,1s}=\frac{3}{4}ea\vec{k}$. Излучение поляризовано по оси $Oz$.

**4.** Найдите правила отбора для гармонического осциллятора, находящегося в однородном электрическом поле, напряженность которого изменяется по закону $\mathscr{E}=\mathscr{E}_0e^{-i\omega t}$. Поле направлено по оси $Ox$. Заряд частицы равен $e$.

Указание. Воспользуйтесь формулой

$$zH_n=nH_{n-1}+\frac{1}{2}H_{n+1}.$$

Ответ. $\Delta n=\pm 1$, поэтому осциллятор поглощает и испускает кванты света с энергией $\hbar\omega$.

# ГЛАВА VIII. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Отклонение классических частиц от первоначального направления движения, вызванное взаимодействиями с другими частицами, называют рассеянием. В квантовой физике рассеяние понимается шире, так как при взаимодействиях могут происходить изменения внутреннего состояния микрообъектов, т. е. превращения одних частиц в другие. Типичные эксперименты по рассеянию состоят в следующем: имеются неподвижные частицы — мишени, на них направлен поток частиц — снарядов. В результате взаимодействия часть частиц из начального потока выбывает, изменяя характер движения или превращаясь в другие частицы. Различают упругое рассеяние, при котором изменяется только направление движения, но не изменяются число частиц, их энергия и внутренние характеристики — масса покоя, заряд и др.,— и неупругое рассеяние, в результате которого изменяется энергия или вид частиц, появляются новые частицы.

В настоящее время опыты по рассеянию являются основным источником информации при изучении ядер и элементарных частиц, а вместе с тем и при познании фундаментальных свойств и строения материи.

## § 23. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ

**23.1. Дифференциальное и полное сечения рассеяния.** В нашем курсе изучается только упругое рассеяние. Но основные характеристики рассеяния общие для упругих и неупругих процессов — это *дифференциальное* и *полное сечения рассеяния*. Дифференциальное сечение определяется отношением числа рассеянных в единицу вре-

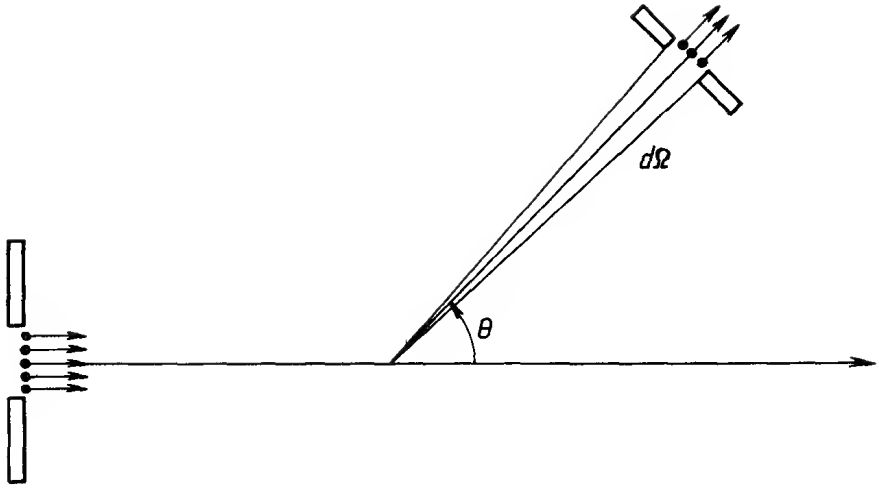



Рис 23 1

мени в элемент телесного угла $d\Omega$ частиц к плотности потока падающих частиц (рис. 23.1):

$$d\sigma = \frac{dN}{j_{\text{пад}}}. \tag{23.1}$$

Величину $dN$ можно представить в виде произведения плотности потока рассеянных частиц на величину площадки $dS$, перпендикулярной этому потоку (поток берется в направлении, заданном углами $\theta$ и $\varphi$):

$$dN = j_{\text{рас}}(\theta, \varphi)\, dS,$$

откуда

$$d\sigma = \frac{j_{\text{рас}}}{j_{\text{пад}}}\, dS. \tag{23.1а}$$

Отсюда видно, что величина $d\sigma$ имеет размерность площади и зависит от углов рассеяния $\theta$ и $\varphi$.

Если все частицы рассеиваются независимо друг от друга, то увеличение интенсивности падающего пучка в несколько раз вызовет увеличение во столько же раз интенсивности рассеянного пучка. Поэтому величина сечения рассеяния не зависит от числа падающих на мишень частиц и определяется только их характеристиками и законом взаимодействия с мишенью. Ниже имеется в виду, что сечение рассеяния относится к одной частице — рассеивающему центру.

В числителе и знаменателе дроби в формуле (23.1а) можно перейти от плотностей потоков частиц к соответствующим плотностям потока вероятности. После этого формулы могут применяться и к одной рассеянной частице. Дифференциальное сечение рассеяния определяет в этом случае вероятность того, что частица испытает рассеяние в элементарный телесный угол $d\Omega$.

Полным или интегральным сечением рассеяния называется отно-

шение числа рассеянных в единицу времени по всем направлениям частиц к плотности потока падающих частиц:

$$\Sigma = \frac{N_{\text{рас}}}{i_{\text{пад}}}.$$

Связь полного сечения с дифференциальным дается соотношением

$$\Sigma = \int d\sigma.$$

Полное сечение рассеяния, так же как и дифференциальное, имеет размерность площади. Его значение определяет размеры перпендикулярной потоку площадки, попадание в которую обязательно вызовет отклонение в движении частиц. Для уяснения смысла полного сечения можно рассмотреть макроскопический пример (рис. 23.2). Если обстреливать шар дробинками, движущимися по законам классической механики, то полное сечение равно поперечному сечению шара. И в микромире, если силы взаимодействия частиц являются короткодействующими и радиус взаимодействия мал, полное сечение рассеяния может быть условно принято за поперечное сечение мишени.

Дифференциальное и полное сечения рассеяния могут быть введены и для характеристики неупругого рассеяния отдельно для каждого типа реакций, происходящих при столкновении. Суммирование по всем реакциям — «каналам» — рассеяния дает полное дифференциальное и полное интегральное сечения рассеяния. (Следует учитывать, что вид рассеянных частиц может не совпадать с исходным и что частицы некоторых сортов получаются в результате нескольких процессов.)

В экспериментах по рассеянию дифференциальные и полные сечения измеряются непосредственно с помощью подсчета рассеянных в фиксированных направлениях частиц при известной интенсивности падающего потока. В качестве мишени берется не одна частица, а тонкий слой вещества, так что результат должен быть пересчитан с учетом числа рассеивающих центров и их расположения — геометрии мишени.

Теория рассеяния, опираясь на основные уравнения механики, ставит и решает задачу о нахождении (расчете) сечения рассеяния

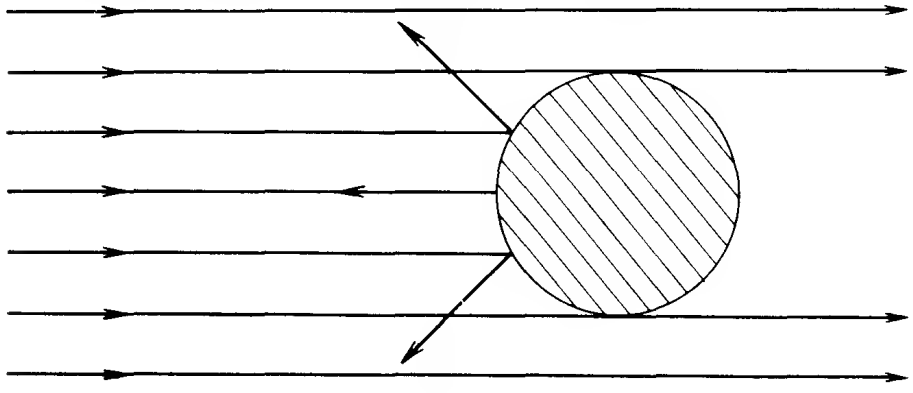


Рис 23 2

в различных случаях взаимодействия между мишенью и рассеиваемыми частицами. В классической механике она решается с помощью основного уравнения динамики или его следствий, в квантовой механике решение этой задачи опирается на уравнение Шредингера. Как и ранее в курсе, оно решается для заданного гамильтониана, но в отличие от *изучавшихся ранее финитных движений* при рассеянии движение рассеиваемых частиц инфинитно.

**23.2. Рассеяние на силовом центре. Амплитуда рассеяния.** Допустим, что взаимодействие рассеивающей и налетающей частиц описывается оператором потенциальной энергии $\hat{U}(\vec{r})$. Это значит, что *нам нужно* исследовать движение частицы-снаряда и частицы-мишени при заданном гамильтониане системы. Такая задача сводится к движению одной (рассеиваемой) частицы с приведенной массой $\mu$ относительно другой — рассеивающего силового центра (см задачу двух частиц, § 14).

Запишем уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(\vec{r})\right]\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \qquad (23.2)$$

Движение заведомо инфинитно, поэтому спектр значений энергии непрерывен.

Пусть поток падающих частиц движется вдоль оси $Oz$, а частица-мишень находится в начале координат. До рассеяния на больших расстояниях от начала координат падающие частицы описываются плоской волной:

$$\psi_{\text{пад}} = e^{ikz},\ k = \frac{p}{\hbar}. \qquad (23\ 3)$$

(При больших $r$ взаимодействием с силовым центром можно пренебречь )

Рассеянные частицы движутся в различных направлениях от мишени. Можно считать, что вдали от центра они вновь движутся свободно. Имея в виду, что вероятность нахождения частицы в единице объема убывает пропорционально квадрату расстояния до рассеивающего центра, запишем функцию состояния рассеянной частицы в следующем виде:

$$\psi_{\text{рас}} = \frac{f(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr}. \qquad (23.4)$$

Функция $f(\theta, \varphi)$ определяет вероятность рассеяния частицы по различным направлениям от центра и называется *амплитудой рассеяния*

Вычислим плотность потока вероятности в падающей и рассеянной волнах. Используя формулы (3.23) и (3.15), находим

$$j_{\text{пад}} = (j_z)_{\text{пад}} = \frac{p}{\mu},\ j_{\text{рас}} = (j_r)_{\text{рас}} = \frac{p}{\mu r^2}|f(\theta, \varphi)|^2$$

Сейчас можно записать выражение для дифференциального сечения рассеяния. На основании соотношения (23 1а) получаем

$$d\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2\, d\Omega. \qquad (23.5)$$

Из формулы (23.5) видно, что квадрат модуля амплитуды рассеяния определяет дифференциальное сечение рассеяния, т. е. играет роль *плотности вероятности* рассеяния частицы в направлении $\theta$, $\varphi$. В теории задача о рассеянии, как правило, сводится к расчету амплитуды рассеяния по заданному силовому полю $U(\vec{r})$. (После этого находятся и сечения рассеяния $d\sigma$, $\Sigma$.)

**23.3. Общий вид амплитуды рассеяния на силовом центре.** На основании формул (23.3) и (23.4) вдали от начала координат функцию состояния частицы в силовом поле рассеивающего центра следует представить как суперпозицию волн $\psi_{\text{пад}}$ и $\psi_{\text{рас}}$:

$$\psi = e^{ikz} + \frac{f(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr}. \tag{23.6}$$

Определение неизвестной функции $f(\theta, \varphi)$ — амплитуды рассеяния — производится путем отыскания решения уравнения Шредингера (23.2) в виде (23.6).

Задача эта может быть решена для конкретных силовых полей, заданных функцией $U(\vec{r})$ в простейших случаях, да и тогда весьма сложна в математическом отношении. Мы воспользуемся следующим выражением для функции состояния, справедливым для любых $U(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int U(r') \psi(r') e^{-ik\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}} dV' \quad (r \gg 1,\ |z| \gg 1) \tag{23.7}$$

Искомая амплитуда рассеяния находится из выражения (23.7) с учетом соотношения (23.6):

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') e^{ik\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}} dV' \tag{23.8}$$

Формула (23.8) является общей в том смысле, что выражает $f(\theta, \varphi)$ с помощью квадратур для любых функций $U(\vec{r})$. Однако мы далеки еще от окончательного ответа; в выражения (23.7) и (23.8) входит неизвестная функция $\psi(\vec{r})$ — решение уравнения для рассеяния (23.2). И все же достигнуто значительное продвижение в нахождении амплитуды рассеяния, ибо с помощью формулы (23.8) можно произвести ее приближенный расчет. Это будет выполнено в следующем пункте.

Для вывода формулы (23.7) покажем сначала, что решение уравнения (23.2) может быть представлено в виде

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ikR}}{R} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') dV', \tag{23.8 а}$$

где $R = |\vec{r} - \vec{r}'|$ и $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E$.

Подействуем оператором Лапласа на обе части равенства (23.8 а):

$$\Delta\psi = -k^2 e^{ikz} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \Delta\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right) dV'. \tag{23.8 б}$$

Нетрудно проверить, что

$$\Delta\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)=e^{ikR}\Delta\left(\frac{1}{R}\right)+\frac{1}{R}\Delta(e^{ikR})+2\nabla\left(\frac{1}{R}\right)\nabla(e^{ikR}). \quad (23.8\text{ в})$$

Кроме того, известно, что

$$\Delta\left(\frac{1}{R}\right)=-4\pi\delta(\vec{R})=-4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}').$$

Подставим это выражение в формулу (23.8 в) и произведем дифференцирование во втором и третьем слагаемых:

$$\Delta\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)=-4\pi\delta(\vec{R})\,e^{ikR}-k^2\frac{e^{ikR}}{R}.$$

Если это соотношение подставить в формулу (23.8 б) и проинтегрировать по $\vec{r}'$, то получим

$$\Delta\psi=-k^2e^{ikz}+\frac{\mu k^2}{2\pi\hbar^2}\int\frac{e^{ikR}}{R}U(\vec{r}')\,\psi(\vec{r}')\,dV'+\frac{2\mu}{\hbar^2}U(\vec{r})\,\psi(\vec{r}),$$

или

$$\Delta\psi=-k^2\psi+\frac{2\mu}{\hbar^2}U(\vec{r})\,\psi,$$

что совпадает с уравнением (23.2).

Доказано, что функция $\psi(\vec{r})$, определенная равенством (23.8 а), является решением уравнения (23.2).

Далее, пусть размеры области, в которой потенциальная энергия $U(\vec{r})$ заметно отлична от нуля, много меньше рассматриваемых расстояний. В таком случае можно воспользоваться приближенной формулой

$$R=\sqrt{r^2-2\vec{r}\vec{r}'+r'^2}=\simeq r-\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}.$$

Тогда при $r\to\infty$

$$\psi(\vec{r})=e^{ikz}-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int U(\vec{r}')\,\psi(\vec{r}')\,e^{-ik\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}}dV'.$$

Формула (23.7) верна.

**23.4. Определение амплитуды рассеяния в первом приближении теории возмущений.** Для определения амплитуды рассеяния по формуле (23.8) обычно прибегают к приближенным методам.

Применим теорию возмущений. Невозмущенной системе соответствует свободное движение частицы без взаимодействия с силовым центром, так что функция состояния в нулевом приближении известна:

$$\psi_0(\vec{r})=e^{ikz}. \quad (23.9)$$

В этом приближении рассеяния нет:

$$f_0(\theta,\varphi)=0.$$

Если подставить функцию (23.9) вместо $\psi(\vec{r})$ в формулу (23.8), то получим выражение для амплитуды рассеяния в первом приближении теории возмущений:

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int U(\vec{r}')\,e^{ikz'}e^{-ik\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}}dV'. \quad (23.10)$$

Для придания формуле (23.10) вида, удобного при вычислениях, введем векторы $\vec{K}_0$ и $\vec{K}$. Вектор $\vec{K}_0$ направлен вдоль оси $Oz$ в сторону движения падающей частицы. Вектор $\vec{K}$ показывает направление движения рассеянной частицы. Рассеяние упругое, поэтому $|\vec{K}| = |\vec{K}_0|$.

Формулу (23.10) перепишем с учетом введенных обозначений:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{K}\vec{r}'} U(\vec{r}')\, e^{i\vec{K}_0\vec{r}'} dV'. \qquad (23.11)$$

Такова амплитуда рассеяния на силовом центре в первом приближении теории возмущений. Если функция $U(\vec{r}')$ задана, то $f(\theta, \varphi)$ вычисляется.

Характерно, что амплитуда рассеяния выражена через интеграл, представляющий собой матричный элемент перехода от начального состояния движения к конечному под действием возмущения $U(\vec{r})$:

$$f = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} U_{\vec{K}_0\vec{K}}. \qquad (23.12)$$

При этом предполагается, что движение после рассеяния можно описать плоской волной $e^{i\vec{K}\vec{r}}$ (см. о квантовых переходах, § 21).

Это не является случайным. К формуле (23.12) можно прийти другим путем на основе нестационарной теории возмущений. Ход рассуждений примерно такой.

Частица до и после рассеяния описывается гамильтонианом невозмущенного состояния $\hat{H}_0$. Пусть его собственные функции $\psi_n$ и $\psi_m$ определяют начальное и конечное состояния. При $t = -\infty$ частица двигалась свободно, затем «включается» возмущение — частица испытывает действие поля $U(\vec{r})$, после чего она (в пределе при $t = \infty$) снова движется свободно. Если по этим данным вычислить вероятность перехода из состояния $n$ в состояние $m$ и связать ее с сечением рассеяния, то получится формула (23.12).

## § 24. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

**24.1. Сечение рассеяния в борновском приближении.** Очень часто силы взаимодействия между частицами являются центральными. В таком случае поле рассеивающего центра обладает центральной симметрией. Если $U = U(r)$, то формула (23.11) допускает упрощения. Вспомним, что $|\vec{K}_0| = |\vec{K}| = k$, вектор $\vec{K}_0$ направлен вдоль оси $Oz$, а вектор $\vec{K}$ расположен под углом $\theta$ к этой оси. Введем вектор $\vec{q} = \vec{K}_0 - \vec{K}$, и формула (23.11) запишется компактнее:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}')\, e^{i\vec{q}\vec{r}'} dV'. \qquad (24.1)$$

Выражение для амплитуды рассеяния (24.1) называется формулой Борна, а основанные на ней расчеты — борновским приближением.

При вычислении интеграла в формуле (24.1) направим ось $Oz$ по вектору $q$:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} U(r')\, e^{iqr' \cos\theta'} r'^2 \sin\theta' dr' d\theta' d\varphi'.$$

Интегрируя по переменной $\varphi'$, получаем

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r')\, r'^2 dr' \int_0^{\pi} e^{iqr' \cos\theta'} \sin\theta' d\theta'.$$

Сделаем подстановку $x = \cos\theta'$:

$$\int_0^{\pi} e^{iqr' \cos\theta'} \sin\theta' d'\theta' = \int_{-1}^{1} e^{iqr'x} dx = \frac{e^{iqr'x}}{iqr'}\Big|_{-1}^{1} = \frac{2\sin qr'}{qr'}.$$

Опуская штрих у переменной интегрирования $r'$, приходим к следующему выражению для амплитуды рассеяния:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r)\, r \sin qr dr. \qquad (24.2)$$

Подставляя найденное значение амплитуды рассеяния в формулу (23.5) и учитывая, что

$$q = 2k \sin\frac{\theta}{2},$$

получаем сечение рассеяния:

$$d\sigma = \frac{\mu^2}{k^2\hbar^4 \sin^2\frac{\theta}{2}} \left[\int_0^{\infty} U(r)\, r \sin\left(2kr \sin\frac{\theta}{2}\right) dr\right]^2 d\Omega. \qquad (24.3)$$

Формула (24.3) и является окончательной для расчета сечения рассеяния в центральном поле в первом приближении теории возмущений. Дифференциальное сечение рассеяния оказалось не зависящим от угла $\varphi$, т. е. в центральных полях всегда имеет место осевая симметрия рассеяния. (Этот результат не связан с приближенным характером формулы (24.3).)

При малых углах, когда $\theta \to 0$, можно принять

$$\sin\left(2kr \sin\frac{\theta}{2}\right) \simeq 2kr \sin\frac{\theta}{2}.$$

Тогда

$$d\sigma = \frac{4\mu^2}{\hbar^2}\left[\int_0^{\infty} U(r)\, r^3 dr\right]^2 d\Omega.$$

В этом случае рассеяние вообще не зависит от направления в

пространстве, т. е. изотропно. Не зависит оно и от энергии рассеиваемых частиц.

Дополнительный анализ показывает, что условия применимости борновского приближения могут быть записаны в виде двух неравенств

$$\frac{\mu U_0}{\hbar^2} d^2 \ll 1, \quad \frac{\mu U_0 d}{k\hbar^2} \ll 1.$$

В них $d$ — радиус области, где потенциальная энергия $U(r)$ заметно отлична от нуля; параметр $U_0$ характеризует интенсивность поля в этой части пространства. Если кривая $U(r)$ образует потенциальную яму, то выполнение первого неравенства приводит к отсутствию связанных состояний. Второе неравенство выполняется при высоких энергиях. Быстрые частицы слабо отклоняются полем, и чем больше их скорость, тем ближе их движение к свободному.

**24.2. Формула Резерфорда.** В качестве примера применения формулы (24.3) рассмотрим рассеяние быстрых α-частиц на ядрах атомов. Потенциал поля запишем в следующем виде:

$$U = \frac{\beta}{r} e^{-\lambda r}, \quad \beta = \varkappa 2Ze^2,$$

где первый сомножитель $\frac{\beta}{r}$ описывает кулоновское отталкивание α-частицы от ядра, а с помощью экспоненциального сомножителя учтено, что за пределами атома электрическое поле быстро затухает, так как электроны экранируют ядро. (Прямое взаимодействие α-частицы с электронами практически не сказывается на ее движении вследствие большой разницы в массах. Поэтому оно и не включено в формулу для потенциала.)

Вычислим интеграл, входящий в сечение рассеяния (24.3). Он легко берется, если использовать соотношение

$$\sin qr = \frac{1}{2i}(e^{iqr} - e^{-iqr}).$$

Получаем

$$\int_0^\infty U(r)\, r \sin qr dr = \beta \int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin qr dr = -\frac{\beta}{q\left(1 + \frac{\lambda^2}{q^2}\right)}.$$

Подставим найденное значение интеграла в формулу (24.3):

$$d\sigma = \left(\frac{\varkappa \mu Z e^2}{\hbar^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right)^2 \frac{d\Omega}{\left(1 + \frac{\lambda^2}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right)^2}. \tag{24.4}$$

Постоянная λ очень мала, поэтому слагаемым $\frac{\lambda^2}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}$ можно пренебречь. Тогда

$$d\sigma = \left(\frac{\varkappa Z e^2 \mu}{p^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \tag{24.5}$$

где $p=\hbar k$ — импульс частицы. Эта формула была первоначально выведена сотрудниками Резерфорда с помощью классической механики без учета экранирования ядра. В данном случае классическая и квантовая теории рассеяния дают один и тот же результат, причем соотношение (24.5) является точным (см. ч. I, § 28).

Рассеяние в поле с кулоновским потенциалом имеет особенность: при $\theta \to 0$ амплитуда рассеяния неограниченно растет, обращается в бесконечность также и полное сечение рассеяния. Причина заключается в том, что кулоновское поле медленно спадает при $r \to \infty$, так что частицы испытывают отклонение, проходя на любых расстояниях от ядра. Число частиц, рассеянных на малые углы, становится сколь угодно большим. Учет экранирования ядра электронами, как показывает формула (24.4), устраняет эту особенность; сечение рассеяния становится конечным.

**24.3. Матрица рассеяния.** Обсудим с качественной стороны процесс рассеяния, опираясь на понятие о квантовом переходе. При этом будем иметь в виду как упругие, так и неупругие столкновения и тем самым познакомимся с теоретическим подходом к процессам взаимных превращений частиц.

До взаимодействия и после него имеется система свободных частиц, которая описывается гамильтонианом $\hat{H}_0$. Состав же системы до и после столкновения может быть различен.

Пусть $\varphi_n$ — волновая функция начального состояния системы. Это одна из собственных функций самосопряженного оператора $\hat{H}_0$. Конечному состоянию отвечает некоторая функция состояний $\psi$, ее можно представить в виде суперпозиции собственных функций $\hat{H}_0$:

$$\psi=\sum_k S_{kn}\varphi_k.$$

Коэффициенты $S_{kn}$ определяют вероятности перехода из $n$-го состояния в $k$-е:

$$W_{kn}=|S_{kn}|^2.$$

Набор чисел $S_{kn}$ носит название *матрицы рассеяния* или $S$-матрицы. Если $S$-матрица известна (найдена), то задача о рассеянии решена: через величины $|S_{kn}|^2$ можно найти сечения рассеяния для каждого из возможных каналов реакции, т. е. вероятность возникновения различных частиц при взаимодействии исходных между собой.

Матрица рассеяния в принципе может быть найдена из решения уравнения Шредингера (или соответствующих уравнений релятивистской квантовой физики). Значения матричных элементов $S_{kn}$ вычисляются с помощью теории возмущений в общих чертах так же, как находились коэффициенты $C_{mn}$ в § 21, причем в формулах (21.16) и (21.17) нужно произвести интегрирование по $t$ в пределах от $-\infty$ до $\infty$. Допустим, что эти формулы пригодны для вычисления элементов $S$-матрицы. В соотношении (21.17) фигурируют промежуточные состояния невозмущенной системы. В данном случае промежуточным состояниям можно сопоставить наборы частиц, отличающиеся от их начального и конечного наборов. Частицы, живущие короткое время и соответствующие промежуточным состояниям, называются *виртуальными*. Их непосредственное обнаружение с физической точки зрения невозможно, ибо энергия виртуальных частиц не превышает неопределенность энергии системы реальных частиц, находящейся при взаимодействии в нестационарном состоянии. (Согласно соотношению неопределенностей $\Delta E\tau \geqslant 2\pi\hbar$; $\tau$ — время жизни, а $\Delta E$ — энергия виртуальных частиц.) Несмотря на невозможность «самостоятельного» существования, виртуальные частицы являются переносчиками всех взаимодействий между реальными частицами в современной релятивистской квантовой теории.

Обычно считают, что для виртуальных частиц нарушена связь между энергией и импульсом, даваемая формулой Эйнштейна (см. ч. II, (4.15)). Однако законы сохранения энергии импульса, момента импульса, заряда в системе реальных частиц выполняются и при участии виртуальных частиц. Существование виртуальных частиц под-

утверждается многими микроявлениями, которые объясняются квантово-релятивистской моделью взаимодействия.

Рассмотрим *электромагнитные взаимодействия* при высоких энергиях между электронами, позитронами и фотонами. Функции состояния этих частиц находятся из невозмущенных релятивистских уравнений для свободных частиц, а элементы матрицы рассеяния находятся через матричные элементы оператора взаимодействия заряженной частицы с полем во втором и следующих приближениях теории возмущений. Каждому приближению теории сопоставляется обмен взаимодействующих частиц виртуальными фотонами.

Существенно, что матричные элементы содержат малый множитель — безразмерную постоянную тонкой структуры: $\alpha=\frac{\varkappa e^2}{\hbar c}\simeq\frac{1}{137}$. При нахождении элементов матрицы рассеяния получаются ряды, содержащие слагаемые, пропорциональные $\alpha$, $\alpha^2$ и т. д., что обусловливает хорошую сходимость рядов и высокую степень точности начальных приближений. Таким образом, малость постоянной $\alpha$ лежит в основе многих успехов квантовой электродинамики.

Другие взаимодействия между элементарными частицами также исследуются методами теории возмущений, но здесь встречаются большие трудности, так как в ряде случаев неизвестен точный вид оператора взаимодействия, а константа связи, аналогичная постоянной $\alpha$, не мала. (Ее значение при сильных взаимодействиях оказывается порядка единицы и более.) Тем не менее в настоящее время *теорию сильных взаимодействий — квантовую хромодинамику* — удалось развить по той же принципиальной схеме взаимодействия с помощью виртуальных частиц. Оказалось, что при малом расстоянии между составными частями адронов — кварками — сильные взаимодействия ослабевают и константа взаимодействия становится малой, что и позволяет применять теорию возмущений. Переносчиком взаимодействия оказывается новая виртуальная частица — глюон (см. [20]).

Ранее оригинальный метод исследования, не утративший значения и в настоящее время, был предложен Гейзенбергом. Можно изучать взаимодействие частиц, не обращаясь к уравнению Шредингера или другим каким-либо квантовым уравнениям, а основываясь прямо на свойствах $S$-матрицы. Теория строится на некоторых аксиоматических положениях, достаточных для определения матричных элементов $S_{mn}$ и описания экспериментальных данных. Матрица рассеяния должна удовлетворять ряду требований, выполнение которых необходимо, чтобы она давала информацию о реальных процессах. В частности, на нее накладывается условие унитарности:

$$\sum_k S^*_{mk}S_{kn}=\delta_{mn},$$

которое связано с тем, что сумма вероятностей рассеяния по всем возможным каналам реакций должна равняться единице. Элементы матрицы не зависят от выбора системы координат, они являются аналитическими функциями энергии и других параметров. При обращении времени матрица не изменяется, что приводит к одинаковой вероятности прямых и обращенных во времени переходов.

## Методические указания и рекомендации

**1.** Теория рассеяния — важное составное звено квантовой механики. Ряд понятий и методов теории используется в ядерной физике и в физике элементарных частиц. Нельзя обойтись без них и в соответствующих разделах курса теоретической физики пединститута. Поэтому сущность явления рассеяния, его основные характеристики — сечение и амплитуда рассеяния, квантово-механическая их трактовка и постановка вопроса о теоретическом расчете сечений с помощью уравнения Шредингера — должны твердо усваиваться студентами.

Что же касается довольно сложных выкладок (§ 23, п. 2 и § 24, п. 1), то, по-видимому, нужно добиваться понимания их основных этапов. Ведь, по сути дела, в вопросах рассеяния мы вступаем в об-

ласть специальных приложений квантовой механики и углубляться в них в пединститутском курсе невозможно.

Для расширения горизонтов квантовой физики в сознании читателей в курс введен § 24, п. 3.

**II.** Студентам следует знать сущность упругого и неупругого рассеяний, определение дифференциального и интегрального сечений рассеяния, взаимосвязь классического и квантово-механического подхода к этим определениям, связь амплитуды рассеяния с сечением; понимать постановку задачи о рассеянии в квантовой механике, т. е. писать формулу (23.6) на основании качественных соображений, знать формулу амплитуды рассеяния в первом приближении теории возмущений (23.11). Студенты должны ориентироваться в выводе амплитуды рассеяния на силовом центре и уметь переходить к первому приближению, объяснять применение формулы (23.11) к центральному полю и ориентироваться в выводе формулы Резерфорда (24.5), смысл которой должен раскрываться детально. Существенно понимание отображения теоретических понятий и формул рассеяния на практические опыты и измерения в них.

Применение формул рассеяния иллюстрируется в упражнениях, где рассмотрены самые простые и физически наглядные случаи.

## Упражнение VIII

**1.** Вычислите в борновском приближении амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния на сферической потенциальной яме: $U=-|U_0|$, если $r\leqslant R$, $U=0$, если $r>R$.

Р е ш е н и е.

По формуле (24.2)

$$f(\theta)=\frac{2\mu|U_0|}{q\hbar^2}\int_0^R r\sin qr dr=\frac{2\mu|U_0|R}{\hbar^2q^2}\left(\frac{\sin qR}{qR}-\cos qR\right),$$

$$d\sigma=\frac{(2\mu|U_0|)^2}{\hbar^2}\,\frac{(\sin qR-qR\cos qR)^2}{q^3}\,d\Omega.$$

**2.** Определите в борновском приближении дифференциальное и полное сечения рассеяния в потенциальном поле: $U=B\delta(\vec{r})$ («удар» о точечный силовой центр).

Р е ш е н и е.

$$f(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int B\delta(\vec{r})\,e^{i\vec{q}\vec{r}}dV=-\frac{\mu B}{2\pi\hbar^2},$$

$$d\sigma=\frac{\mu^2B^2}{4\pi^2\hbar^4}\,d\Omega,\quad \Sigma=\frac{\mu^2B^2}{\pi\hbar^4}.$$

**3.** Определите сечение рассеяния для упругого столкновения двух тождественных частиц.

Р е ш е н и е.

Координатная часть волновой функции системы из двух тождественных частиц должна быть симметричной или антисимметричной относительно перестановки частиц местами. В системе отсчета,

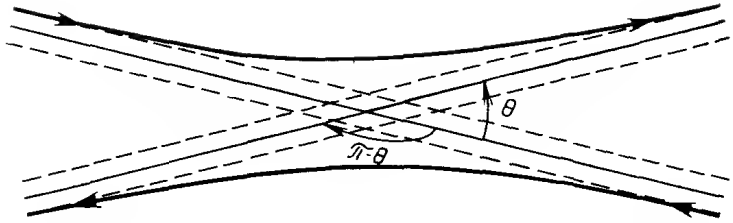



Рис. 23.3.

связанной с центром масс, $\vec{r}_1 = -\vec{r}_2$; поэтому перестановке частиц отвечает замена сферической координаты $\theta$ на $\pi - \theta$ (рис. 23.3).

Функция состояния первой частицы удовлетворяет краевому условию на бесконечности:

$$\psi_1 = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}.$$

Для второй частицы

$$\psi_2 = e^{-ikz} + \frac{f(\pi-\theta)}{r} e^{ikr}.$$

Волновая функция системы с учетом ее симметрии при $r \to \infty$ имеет вид

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} [f(\theta) \pm f(\pi-\theta)].$$

Это суперпозиция двух плоских волн, распространяющихся навстречу друг другу, и одной сферической, которая описывает удаление частиц от начала координат после их взаимодействия.

В силу тождественности частицы неразличимы, и сечение рассеяния определяет вероятность обнаружения любой из них в телесном угле $d\Omega$; поэтому

$$d\Omega = |f(\theta) \pm f(\pi-\theta)|^2 d\Omega.$$

**4.** Рассчитайте упругое рассеяние $\alpha$-частиц на $\alpha$-частицах.

Р е ш е н и е.

Пользуясь формулой Резерфорда (24.5) и данными задачи 3, пишем

$$f(\theta) = \frac{A}{\sin^2\frac{\theta}{2}}, \quad f(\pi-\theta) = \frac{A}{\cos^2\frac{\theta}{2}}, \quad A = \frac{2\varkappa e^2 \mu}{p^2},$$

$$d\sigma = A^2\left(\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\theta}{2}} \pm \frac{2}{\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}}\right). \qquad (1)$$

Последнее слагаемое в скобках выражает «добавку» к сечению за счет тождественности частиц: при $\theta = \frac{\pi}{2}$ сечение удваивается. (Во избежание недоразумений следует учесть, что формула (1) верна только при больших энергиях, когда удовлетворяются условия применимости теории возмущений.)

**5.** Перенесите результаты задачи 4 в лабораторную систему отсчета, где вторая частица до столкновения покоится.

Р е ш е н и е.

Формула перехода:

$$d\sigma_л = d\sigma,\ d\sigma_л = \frac{(1+2\gamma\cos\theta+\gamma^2)^{3/2}}{|1+\gamma\cos\theta|}|f(\theta)|^2\, d\Omega_л,$$

$$\gamma = \frac{m_1}{m_2},\ \operatorname{tg}\theta_{1л} = \frac{\sin\theta}{\gamma+\cos\theta},\ \theta_{2л} = \frac{\pi-\theta}{2}.$$

При $m_1 = m_2$

$$d\sigma_л = 2\sqrt{1+\cos\theta}\,|f(\theta)|^2\, d\Omega_л,\ \theta_{1л} = \frac{\theta}{2},$$

$$\theta_{2л} = \frac{\pi-\theta}{2},$$

откуда

$$d\sigma_л = 2\cos\theta_л\left[\frac{1}{\sin^4\theta_л} + \frac{1}{\cos^4\theta_л} \pm \frac{2}{\sin^2\theta_л\cos^2\theta_л}\right]\left(\frac{2\varkappa\mu e^2}{p_{отн}^2}\right)^2 d\Omega_л.$$

**6.** Рассчитайте сечение упругого рассеяния электронов на электронах с учетом спина.

Р е ш е н и е.

Используем формулу (1) задачи 4. Если суммарный спин — 1, то перед последним слагаемым в скобках нужно взять знак «—», если $s=0$, то «+».

# ГЛАВА IX. ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ПОНЯТИЕ О РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ

Изучавшаяся выше в курсе квантовая механика является хотя и фундаментальной, но в то же время лишь малой частью современной квантовой физики. Это *нерелятивистская теория*, т. е. она относится к движениям микрочастиц со скоростями, значительно меньшими скорости света. Соответственно энергии свободных частиц, энергии взаимодействия частиц в системах, энергии связи систем частиц много меньше энергий их покоя (см. ч. II).

Релятивистская физика — это физика больших скоростей, больших энергий. При взаимодействиях релятивистских частиц в общем случае не сохраняется масса покоя; поэтому становятся возможными процессы рождения, уничтожения и взаимопревращения частиц. Так, при столкновениях нуклонов рождаются π-мезоны. Электрон и позитрон, аннигилируя, превращаются в γ-кванты. Электрическое поле, окружающее заряженную частицу, рассматривается как результат непрерывного рождения и поглощения виртуальных фотонов.

Из приведенных примеров видно, что релятивистская область

качественно обособляется от области движений и взаимодействий при малых энергиях.

Завершая курс, мы хотим не только указать те рамки, за пределами которых перестает служить нерелятивистская квантовая теория, но и познакомить читателя с некоторыми идеями релятивистской квантовой теории.

Вопросы, изложенные в этой заключительной главе курса, имеют большое мировоззренческое значение, перебрасывая мосты между учением о движении микрочастиц и учением об их свойствах. Если быть последовательным, то надо сказать, что в настоящее время изучение свойств вещества, элементарных частиц невозможно без знакомства с идеями квантования поля.

Сказанное подтверждает актуальность изложенных ниже материалов для будущего учителя физики. Но нелишне заметить, что нами они сообщаются в ознакомительном плане.

## § 25. РЕЛЯТИВИСТСКОЕ ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ЧАСТИЦ С НУЛЕВЫМ И ЦЕЛЫМ СПИНОМ

**25.1. Границы применимости нерелятивистской квантовой механики и переход в релятивистскую область.** Все изложенное в курсе квантовой механики выше основано на уравнении Шредингера и вероятностно-статистической трактовке его решения — $\psi$-функции, позволяющей определить вероятность местоположения частицы в малой окрестности той или иной точки пространства. Нигде ранее не затрагивался вопрос об отношении функции состояния и уравнения Шредингера к преобразованиям координат при переходе от одной инерциальной системы к другой. Поскольку гамильтонианы записывались по принципу соответствия с классической механикой, то очевидно, что основные уравнения были ковариантны по отношению к преобразованиям Галилея (см. ч. I, § 3), а $\psi$-функции являлись инвариантами, т. е. скалярами этих преобразований. Но это значит, что уравнение Шредингера, применявшееся ранее, справедливо только в нерелятивистской области движений и неприменимо в релятивистской. О том же говорит и нарушение закона сохранения числа частиц в релятивистской области, ибо уравнение Шредингера приводит к этому закону сохранения, не отображает возможность рождения и уничтожения частиц.

В процессе становления квантовой механики найдены лоренц-инвариантные релятивистские уравнения, являющиеся обобщением уравнения Шредингера. Однако переход к релятивистской квантовой теории не сводится к замене одних уравнений другими, так как в релятивистской области изменяется качественный характер изучаемых явлений, а вместе с тем и способ их описания.

Критерий для определения границы релятивистской области следует из соотношения между энергией и импульсом для свободной частицы (см. ч. II, § 4):

$$E=c^2p^2+m^2c^4, \tag{25.1}$$

где $mc^2$ есть энергия покоя. Релятивистской является область импульсов, в которой $p$ сравнимо или больше $mc$. При больших импульсах энергия частицы становится больше энергии покоя частицы, так что закон сохранения энергии не запрещает образование новых частиц. Это, вообще говоря, приводит к непостоянству числа взаимодействующих частиц. Более того, само понятие о частице с неизменными свойствами, участвующей во взаимодействии, в релятивистской области теряет в отдельных случаях смысл.

Релятивистская квантовая механика есть теория волновых полей, у которых возбужденными состояниями, или квантами, являются элементарные частицы, а не механика одной частицы, находящейся в силовом поле, или системы микрочастиц, взаимодействующих посредством силового поля (как это имело место в нерелятивистской механике: ньютоновской и шредингеровской). Взаимодействие между полями приводит к изменению состояния — рождению и уничтожению частиц, физические параметры которых и должны быть определены в теории по виду полей и закону их взаимодействия.

Рассмотрим переход от $\psi$-функции нерелятивистской квантовой механики к волновому полю релятивистской. Хотя микрочастица в нерелятивистской квантовой теории и наделена по отношению к классической материальной точке новыми волновыми свойствами, она все же обладает и корпускулярными свойствами. В частности, согласно толкованию $\psi$-функции в каждый момент времени частица находится с определенной вероятностью в определенной точке пространства. Она отнюдь не заменяется некоторым непрерывно распределенным по пространству материальным полем.

Но такая трактовка функции состояния ограничена релятивистскими рамками: область, в которой локализована микрочастица, не должна быть слишком малой. В самом деле, на основании соотношения неопределенностей (4.7) имеем

$$\Delta p \geqslant \frac{2\pi\hbar}{\Delta x},$$

откуда следует, что нижней границей для энергии частицы, если частица локализована с протяженностью $\Delta x$, оказывается величина:

$$E=pc \sim \frac{2\pi\hbar c}{\Delta x}. \tag{25.2}$$

Когда энергия достаточно велика (больше энергии покоя), то возможно рождение новых частиц. Появляются пары частица — античастица. В таком случае утрачивается смысл локализации частицы в указанной области, а вместе с тем и обычная вероятностно-статистическая трактовка ее функции состояния.

Предельное значение линейных размеров области локализации

для частиц с отличной от нуля массой покоя считается при качественных оценках удовлетворяющим равенству

$$mc^2 = \frac{2\pi\hbar c}{\Delta x},$$

откуда

$$\Delta x = \lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{mc}. \qquad (25.3)$$

Величину $\lambda_0$ называют *комптоновской длиной волны* частицы. Для частиц с массой покоя, отличной от нуля, она тем меньше, чем больше масса. Так, для электрона $\lambda_0$ имеет порядок $10^{-13}$ м, соответственно для протона — в 2 000 раз меньше и т. д.

Для фотона из формулы (25.3) следует

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{p} = \lambda,$$

т. е. комптоновская длина равна длине соответствующей электромагнитной волны.

Говорить о локализации микрочастицы в области с размерами, меньшими комптоновской длины волны этой частицы, бессмысленно: в такой области утрачивает смысл и вероятностно-статистическая трактовка функции состояния. Если невозможна локализация, то невозможны и связанные состояния микрочастицы в системе с размерами, меньшими комптоновской длины волны этой микрочастицы. Здесь в соответствии с соотношением неопределенностей для энергии и времени могут находиться только виртуальные частицы, время жизни которых определяется размерами области: $\tau \simeq \frac{\Delta x}{c}$. Энергия и масса виртуальных частиц находятся из формулы (4.10)

$$\varepsilon \simeq \frac{2\pi\hbar}{\tau} = \frac{2\pi\hbar c}{\Delta x}.$$

Виртуальные частицы передают взаимодействие между сблизившимися на расстояние $\Delta x$ реальными частицами.

В релятивистской квантовой механике в качестве исходного объекта берутся не взаимодействующие между собой — свободные — микрочастицы. Для них релятивистская волновая функция, не давая каких-либо сведений о положении частиц в пространстве, несет определенную информацию о параметрах частиц — энергии, импульсе, моменте, спине, четности и т. д. Волновая функция теперь отождествляется с некоторым волновым полем, описывающим состояние микрочастицы через ее параметры. Как это делается, показано ниже, а находят волновые функции с помощью релятивистских уравнений для свободных частиц.

*Основная задача релятивистской теории состоит в расчете вероятностей переходов (сечений рассеяния) в системе свободных до и после взаимодействия микрочастиц, т. е. в расчете результата взаимодействия.* Соответственно в ней заданы импульсы частиц до

и после взаимодействия; поэтому функции состояния рассматривают как функции импульсов, а не координат.

Задача решается с помощью методов теории нестационарных возмущений (см. § 21), причем функции состояния невозмущенной системы составляются из функций состояния свободных частиц (волновых полей), вступающих во взаимодействие. Оператор же возмущения есть релятивистски-инвариантный оператор взаимодействия волновых полей. Такова в самых общих чертах постановка вопроса о микрочастицах и их взаимодействии в релятивистской квантовой механике.

Заметим, что в современной теории релятивистские уравнения играют вспомогательную роль, ибо волновые функции свободных состояний могут быть написаны и без них, из соображений лоренц-инвариантности. Однако в истории развития квантовой теории к волновым полям пришли на основе релятивистских уравнений Клейна-Гордона — Фока, Паули, Дирака и др.

Помимо задач на рассеяние релятивистская квантовая механика решает и задачи на расчет связанных состояний в *квазирелятивистской* области, где используются релятивистские уравнения движения, но применимо еще описание с помощью координатной функции состояния и возможна ее вероятностно-статистическая трактовка Расчеты с помощью уравнения Дирака уточняют, например, уровни энергии атома водорода

Мы ограничимся рассмотрением релятивистских уравнений для свободных частиц и придем с их помощью к понятиям о спине, частицах и античастицах. Следует заметить, что изложенное ниже носит характер введения и иллюстраций к отдельным понятиям релятивистской квантовой физики и отнюдь не раскрывает основного содержания этой науки.

**25.2. Уравнение Клейна — Гордона — Фока.** Гамильтониан для свободной частицы в нерелятивистской теории выбирается по принципу соответствия на основе классической формулы связи энергии и импульса:

$$E=\frac{p^2}{2m}. \tag{25.4}$$

И само уравнение Шредингера для этого случая можно получить формальным приемом: достаточно заменить в формуле (25.4) $E$ на оператор $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, а вектор $\vec{p}$ — на оператор $\hat{\vec{p}}$ и подействовать этими операторами на волновую функцию $\psi$. В результате вместо формулы для энергии получается уравнение Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\psi.$$

Для получения тем же способом релятивистского уравнения следует воспользоваться релятивистской связью между $E$ и $\vec{p}$ — формулой (25.1)

$$\frac{\hbar^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi=(\hbar^2\Delta-m^2c^2)\psi.$$

После очевидных преобразований имеем

$$\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right)\psi = -m^2c^2\psi. \qquad (25.5)$$

Придадим уравнению (25.5) четырехмерную форму, используемую в СТО (см. ч. II, § 3 и 4). Для этого введем оператор $\hat{p}_\alpha$ ($\alpha = 0, 1, 2, 3$) с проекциями:

$$\hat{p}_0 = \frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t},\ \hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_2 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_3 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad (25.6)$$

Подставим выражения (25.6) в формулу (25.5) и получим

$$\sum_{\alpha=0}^{3} (\hat{p}_\alpha)^2\psi = -m^2c^2\psi,$$

или

$$\hbar^2 \Box\, \psi = -m^2c^2\psi, \qquad (25.7)$$

где $\Box$ — лоренц-инвариантный оператор Даламбера.

Для обсуждения лоренц-инвариантности уравнений (25.5) и (25.7) необходимо указать, как преобразуется функция $\psi(x, y, z, t)$. Если потребовать, чтобы величина $\psi$ была скаляром преобразований Лоренца, то мы и получим первое и простейшее релятивистское уравнение, предложенное в 1926 г. и известное под названием уравнения Клейна — Гордона — Фока Но уравнение Клейна — Гордона — Фока можно записывать и для тензора преобразований Лоренца $\psi_{\alpha,\ \beta,}$ любого ранга.

Уравнение Шредингера в нерелятивистской области универсально в том смысле, что без учета спина оно может быть применено для любых микрочастиц. Релятивистское уравнение Клейна — Гордона — Фока в случае скалярных $\psi$-функций приложимо только к бесспиновым частицам, например к $\pi$-мезонам. Тензорные функции описывают частицы с целым спином Однако важнейший класс микрочастиц с полуцелым спином — фермионы — этим уравнением не охватываются.

Частицы со спином, равным 1, описываются функцией, являющейся вектором преобразований Лоренца:

$$\psi_0 = 0,\ \psi_k = \psi_k(x, y, z, t),\ k = 1, 2, 3.$$

Соответствующее уравнение Клейна — Гордона — Фока сводится в этом случае к трем скалярным уравнениям

$$\Box\, \psi_k = -m^2c^2\psi_k. \qquad (25.8)$$

Уравнения (25.8) применяются к так называемым векторным мезонам. (Примером могут служить $K$-мезоны.)

Известны и частицы с целочисленными спинами, бóльшими единицы. Они описываются тензорными функциями состояния соответствующих рангов, каждая из компонент которых удовлетворяет уравнению (25.7) (Но все компоненты, содержащие индекс 0, равны 0.) Спин, таким образом, оказывается непосредственно связан-

ным с поведением волновой функции по отношению к преобразованиям Лоренца, с ее *многокомпонентностью*: спиновое число частицы $s$ равно рангу тензорной волновой функции. В соответствии с математическим формализмом описания спина, изложенным в § 13, волновая функция микрочастицы с учетом спина многокомпонентна:

для нулевого спина $\psi = \psi(x, y, z, t)$ — одна компонента;

для единичного спина

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z, t) \\ \psi_2(x, y, z, t) \\ \psi_3(x, y, z, t) \end{pmatrix} —$$

три компоненты и т. д. (о полуцелом спине речь пойдет ниже).

Итак, в релятивистской теории многокомпонентность волновых функций, а вместе с ней и спины микрочастиц связаны с лоренц-инвариантностью $\psi$-функций и основного уравнения для рассматриваемых частиц.

Уравнение Клейна — Гордона — Фока (25.7) может быть обобщено на движение частицы в потенциальном поле (квазирелятивистский случай), но мы ограничимся случаем свободного движения, так как здесь сравнительно просто и наглядно выявляются качественные особенности описания микрочастиц в релятивистской квантовой механике.

Получим уравнение непрерывности для изучаемого уравнения. Для этого обе части уравнения (25.5) умножим на $\psi^*$ и из полученного выражения вычтем ему комплексно-сопряженное. Приходим к равенству

$$\frac{\hbar^2}{c^2}\left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2}\right) = \hbar^2 (\psi^* \Delta\psi - \psi \Delta\psi^*).$$

Отсюда

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\hbar^2}{c^2}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) = \nabla \hbar^2 (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*).$$

Правая часть с точностью до постоянного сомножителя совпадает с выражением плотности потока вероятности в шредингеровской теории. Вводя недостающий сомножитель $\frac{i}{2m\hbar}$, получаем

$$-\frac{\partial}{\partial t}\frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) = \nabla \frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*). \qquad (25.9)$$

Поскольку вектор

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) \qquad (25.10)$$

есть плотность потока вероятности, то плотность вероятности выражается в случае релятивистского уравнения (25.5) новой величиной:

$$w = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right). \qquad (25.11)$$

Из формулы (25.11) видно, что $w$ может принимать отрицательные значения. Это вызывает трудности в интерпретации понятия о вероятности местоположения частицы в пространстве без учета каких-либо других ее свойств, кроме входящей в формулу массы. Однако в уравнении Клейна — Гордона — Фока заключены возможности выявления дополнительных свойств частицы для снятия указанной трудности.

**25.3. Частицы и античастицы.** Ищем решение уравнения (25.5) в виде плоской волны:

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

Подстановка этого предполагаемого решения в уравнение (25.5) дает

$$\frac{E^2}{c^2} = p^2 + m^2c^2, \quad E_{1,2} = \pm c\sqrt{p^2 + m^2c^2} = \pm\varepsilon, \qquad (25.12)$$

где

$$\varepsilon = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}.$$

Таким образом, плоские волны являются решением уравнения для скалярных частиц при условии, что энергия, импульс и масса последних удовлетворяют формуле Эйнштейна (25.12), встречавшейся в курсе ранее, в ч. II, § 4. Там речь шла о макроскопических телах и второе решение ($E_2 < 0$) отбрасывалось как не имеющее физического смысла. Сейчас остановимся на знаке энергии частицы с заданной массой $m$ и импульсом $p$ несколько подробнее.

Согласно формуле (25.12) непрерывное множество положительных значений энергии частицы массой $m$ при всевозможных значениях импульса $p$ ограничено снизу энергией покоя ее $mc^2$. Аналогично отрицательные энергии ограничены сверху значением $-mc^2$. Тем самым вся область допустимых энергий разорвана на две части запрещенным интервалом шириной $2mc^2$ (рис. 25.1).

Макроскопическая физика оперирует с положительными релятивистскими энергиями тел, а поскольку скачкообразных изменений энергии, нарушающих ее непрерывный ход, здесь не встречается, то и не рассматривают отрицательные энергии.

В квантовой физике запрет на скачкообразное изменение энергии снимается, однако и здесь от отрицательных энергий микрочастиц

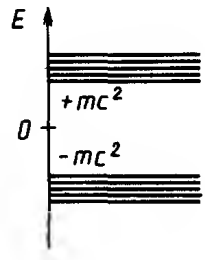
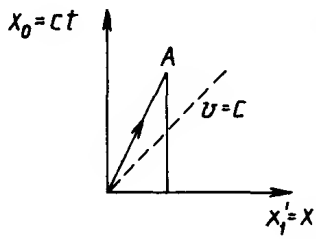



Рис. 25.1.



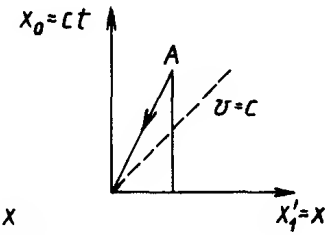




Рис. 25.2.

приходится отказываться. Дело в том, что «дна» у отрицательной области энергии нет, а это означает возможность выделения бесконечных энергий при безграничном опускании частиц вниз по энергетическим состояниям.

Итак, энергия микрочастицы с заданными массой и импульсом всегда положительна и равна величине $\varepsilon$ в формуле (25.12). Учитывая это обстоятельство, запишем оба решения релятивистского уравнения (25.5) для свободных частиц:

$$\psi_{(+)}=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-\varepsilon t)}, \quad \psi_{(-)}=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px+\varepsilon t)}. \tag{25.13}$$

Считается, что эти решения отличаются не энергией частиц: она одна и та же и равна $\varepsilon$, а описывают два различных возможных состояния частицы: $\psi_{(+)}$ соответствует *частице*, а $\psi_{(-)}$ — *античастице*. Частица и античастица характеризуются одной и той же массой, могут обладать (как это имеет место в формулах 25.13) одним и тем же импульсом, но отличаются друг от друга знаком в функции состояния, связанным с таким внутренним параметром, как электрический заряд и др.

Релятивистское уравнение Клейна — Гордона — Фока не только выявляет новую «степень свободы», проявляющуюся как два возможных состояния частицы, но и позволяет связать эту степень свободы с электрическим зарядом частицы.

Вычислим плотность вероятности для частицы и античастицы по формуле (25.11):

$$w_{(+)}=\frac{\varepsilon}{mc^2}|\psi_{(+)}|^2, \quad w_{(-)}=-\frac{\varepsilon}{mc^2}|\psi_{(-)}|^2. \tag{25.14}$$

Если теперь наделить частицы электрическим зарядом, выражающимся некоторым числом $e$, то для плотности заряда получим

$$\rho_{(+)}=\frac{\varepsilon e}{mc^2}|\psi_{(+)}|^2, \quad \rho_{(-)}=-\frac{\varepsilon e}{mc^2}|\psi_{(-)}|^2. \tag{25.15}$$

Иными словами, существуют два состояния частицы, отвечающие двум зарядовым состояниям: $\rho_{(+)}>0$ и $\rho_{(-)}<0$. Отрицательный знак во второй формуле (25.15) можно отнести к заряду. В таком случае частица и античастица отличаются знаком заряда, который принимает два значения: $\pm e$. Поэтому решения $\psi_{(+)}$ и $\psi_{(-)}$ для частицы и античастицы называют *зарядово-сопряженными*.

(Трудности толкования отрицательной плотности в формуле (25.11) теперь исчезают. Речь идет, по существу, о плотности заряда: $\rho=\pm ew$.)

Возможно также связать знак в функции состояния для частицы и античастицы с геометрической интерпретацией движения частицы в четырехмерном пространстве — времени. Для одномерного случая движения частицы и античастицы имеем диаграммы (рис. 25.2). Знак минус отнесем к собственному времени античастицы, идущему в обратном направлении по отношению ко времени наблюдателя и собственному времени частицы. Поэтому для одного и того же им-

пульса в системе наблюдателя направления мировой линии у частицы и античастицы противоположны.

Введение наряду с частицами соответствующих им античастиц в релятивистской области приводит к совершенно новой трактовке волновой функции. В самом деле, общее решение релятивистского уравнения должно быть записано как линейная суперпозиция зарядово-сопряженных решений:

$$\psi = A_1 e^{\frac{i}{\hbar}(px-\varepsilon t)} + A_2 e^{\frac{i}{\hbar}(px+\varepsilon t)}. \qquad (25.16)$$

В соответствии с этим в релятивистской квантовой теории, вообще говоря, вместо отдельных элементарных частиц рассматривается волновое поле $\psi$, возбужденными состояниями (квантами) которого являются частицы и античастицы. Найденное решение (25.16) скалярного уравнения Клейна — Гордона — Фока описывает, например, $\pi$-мезонное поле.

Волновое поле релятивистской теории в общем случае не несет информации о местоположении частицы в пространстве, как об этом уже говорилось в § 25, п. 1. И только в квазирелятивистском случае старая трактовка $\psi$-функции сохраняется.

## § 26. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА

**26.1. Матрицы Дирака и уравнение Дирака.** В 1928 г. Дираку удалось найти релятивистское уравнение, описывающее электроны и позитроны. Это матричное релятивистское обобщение уравнения Шредингера (8.3), сохраняющее формально его вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \qquad (26.1)$$

но теперь в (26.1) $\psi$ — четырехкомпонентная функция, матрица-столбец:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Четырехрядной квадратной матрицей является и гамильтониан:

$$\hat{H} = c(\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}) + mc\beta, \qquad (26.2)$$

где $\vec{\alpha}$ и $\beta$ — четырехрядные матрицы, носящие название матриц Дирака. Значок вектора у матрицы $\vec{\alpha}$ означает, что она представляет собой совокупность трех матриц: $\alpha_x$, $\alpha_y$, $\alpha_z$, для сокращения записей и выкладок объединенных в трехмерную вектор-матрицу.

Введение четырехрядных матриц обусловлено следующими требованиями к разыскиваемому релятивистскому уравнению: оно должно быть лоренц-инвариантным и в то же время содержать первую производную по времени. Но в таком случае в уравнение должны входить

производные первого порядка не только по времени, но и по пространственным переменным. Кроме того, уравнение должно быть, как это требует принцип суперпозиции состояний, линейным. Наконец, вид гамильтониана подсказывает принцип соответствия:

$$\hat{H}^2 = c^2\hat{p}^2 + m^2c^4. \tag{26.3}$$

Анализ показывает, что для обеспечения всех этих требований нельзя ограничиться уравнением для однокомпонентной функции (или, как это было в случае уравнения Клейна — Гордона — Фока, одинаковыми уравнениями для каждой компоненты $\psi_\alpha$), а необходимо ввести многокомпонентную функцию $\psi$ и соответственно матричные соотношения и операторы. Наименьший возможный для выполнения названных выше требований ранг матриц оказывается равным 4. Совокупность перечисленных требований позволяет найти матрицы $\vec{\alpha}$ и $\beta$, введенные в уравнение (26.2). Воспользуемся готовым результатом:

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{26.4}$$

Если теперь, используя матрицы (26.4), записать уравнение (26.1) с гамильтонианом (26.2) для каждой матричной строки, то получим следующие четыре уравнения:

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} &= c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_4 + c\hat{p}_z\psi_3 + mc^2\psi_1, \\ i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} &= c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_3 - c\hat{p}_z\psi_4 + mc^2\psi_2, \\ i\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial t} &= c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_2 + c\hat{p}_z\psi_1 - mc^2\psi_3, \\ i\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial t} &= c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_1 - c\hat{p}_z\psi_2 - mc^2\psi_4. \end{aligned}\right\} \tag{26.5}$$

Формулы (26.5) в совокупности и выражают уравнение Дирака (26.1) в подробной записи.

Гамильтониан (26.2), а вместе с ним и уравнение Дирака и (26.5) написаны для свободной частицы. Для обобщения их на случай движения частицы в потенциальном силовом поле следует прибавить в операторе $\hat{H}$ (26.2) оператор потенциальной энергии, после чего получим

$$\hat{H} = c(\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}) + mc^2\beta + IU(x, y, z, t),$$

где I — единичная матрица. В квазирелятивистском случае предполагается, что внешнее поле слабое, и энергия взаимодействия недостаточна для рождения и уничтожения частиц, так что возможны связанные состояния.

Получим для примера конкретный вид релятивистского гамильтониана заряженной частицы в электромагнитном поле. Для этого в написанном выше гамильтониане нужно от обычного импульса $\vec{p}$ перейти к обобщенному: $\vec{p}_{об}=\vec{p}+q\vec{A}$, ибо известный вид оператора $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$ постулируется в случае обобщенно-потенциальных полей именно для обобщенного импульса. После этого имеем

$$\hat{H}=c\vec{\alpha}(\hat{\vec{p}}-q\vec{A})+mc^2\beta+\mathrm{I}q\varphi, \tag{26.6}$$

где $q$ — заряд частицы; $\vec{A}$ — векторный, а $\varphi$ — скалярный потенциалы электромагнитного поля.

Применяя уравнение Дирака с оператором (26.6), уточняют, в частности, решение задачи об электроне в атоме водорода, выясняя тонкую структуру уровней энергии ($q=-e$).

Мы не будем решать уравнение Дирака для квазирелятивистского случая частицы в силовом поле, а ограничимся свободными частицами. Важные качественные особенности микрочастиц, связанные с релятивистской и квантовой их природой, могут быть выяснены в процессе решения уравнения для свободных частиц. Заметим, что это решение используется в квантовой электродинамике как исходный объект — электронно-позитронное поле.

**26.2. Некоторые свойства решений уравнения Дирака.** Для того чтобы уравнение Дирака сохраняло свою форму во всех инерциальных системах координат, необходимо, чтобы элементы матрицы-столбца $\psi$ определенным образом преобразовались при лоренцовом преобразовании координат. Но если преобразование координат нам известно (см. ч. II, § 3), то преобразование $\psi$-функций, зависящих от этих координат, мы не знаем.

Запишем искомое преобразование в общем виде:

$$\psi'=\lambda\psi, \tag{26.7}$$

где $\lambda$ — матрица, элементы которой определяются матрицей преобразования Лоренца. Волновая функция $\psi$ преобразуется не непосредственно матрицей Лоренца (как вектор предыдущего параграфа), а связанной с ней матрицей $\lambda$, так что все элементы матрицы $\lambda$ находятся через элементы матрицы $\Lambda$.

Далее конкретные значения элементов матрицы $\lambda$ мы использовать не будем; важно лишь, что преобразование для $\psi$, сохраняющее форму уравнения Дирака, известно. В этом случае $\psi$ называется *спинорной функцией* или спинором преобразований Лоренца ранга 1/2.

Аналогично уравнению Клейна — Гордона — Фока § 25 уравнение Дирака приводит к уравнению непрерывности:

$$-\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\psi=\operatorname{div} c\psi^+\vec{\alpha}\psi. \tag{26.8}$$

Введем $\psi^+$ — матрицу-строку, сопряженную матрице-столбцу $\psi$. Исходя из уравнения (26.1) имеем

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}=\psi^+\hat{H}^+=c\,(\hat{\vec{p}}^*\psi^+\vec{\alpha}^+)+mc^2\psi^+\beta^+. \tag{26.9}$$

Умножим теперь уравнение (26.1) на $\psi^+$, а (26.9) — на $\psi$ и найдем разность полученных выражений:

$$i\hbar\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\right)=c\psi^+(\vec{\alpha}\,\hat{\vec{p}})\,\psi+mc^2\psi^+\beta\psi-c\psi\,(\hat{\vec{p}}^*\psi^+\alpha^+)-mc^2\psi\psi^+\beta^+. \tag{26.10}$$

Если учесть явный вид матриц $\vec{\alpha}$ и $\beta$, то соотношение (26.10) преобразуется в уравнение непрерывности (26.8).

Величина $\psi^+\psi$ существенно положительна, и в этом отношении нет препятствий для толкования ее как плотности вероятности положения частицы в пространстве (как это было в случае уравнения Клейна в § 25). Однако многокомпонентность $\psi$-функции приводит к выражению для $\psi^+\psi$ в виде суммы четырех слагаемых:

$$\psi^+\psi=\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2+\psi_3^*\psi_3+\psi_4^*\psi_4. \tag{26.11}$$

В общем случае этой величине нельзя дать прямого толкования плотности вероятности для координат микрочастицы. И лишь в нерелятивистском пределе, как это будет показано далее, возможно описание частицы, близкое к тому, что имело место для решения уравнения Шредингера.

**26.3. Частицы и античастицы, спины частиц и теория Дирака.** Испытываем в качестве решения уравнения Дирака

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(c\vec{\alpha}\,\hat{\vec{p}}+mc^2\beta)\,\psi \tag{26.12}$$

плоскую монохроматическую волну, снабженную матричным сомножителем:

$$\psi=ue^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}, \tag{26.13}$$

где $u$ — некоторая, не зависящая от координат $\vec{r}$ и времени $t$ одностолбцовая матрица; соответственно $\psi$ — четырехкомпонентная функция. Таким образом, предполагается, что имеется свободная частица с массой $m$ и с импульсом $\vec{p}$. Волновую функцию $\psi$ для нее отыскиваем в виде (26.13), определяя параметры $u$ и $E$.

Подстановка (26.13) в уравнение (26.12) дает равенство

$$Eu=(c\vec{\alpha}\,\vec{p}+mc^2\beta)\,u. \tag{26.14}$$

Для нахождения $u$ выразим четырехрядные матрицы $\vec{\alpha}$, $\beta$ через двухрядные матрицы $\vec{\sigma}$, которые встречались ранее, в § 13, под названием матриц Паули. Одновременно заменим четырехрядный столбец $u$ на два двухрядных:

$$u=\begin{pmatrix}\omega\\ \omega'\end{pmatrix}.$$

В результате получим

$$E\begin{pmatrix}\omega\\ \omega'\end{pmatrix}=\left\{c\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ \vec{\sigma} & 0\end{pmatrix}\vec{p}+mc^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\omega\\ \omega'\end{pmatrix}. \tag{26.15}$$

Равенство (26.15), прочитанное по строкам для двухрядных матриц, приводит к системе уравнений

$$\left.\begin{aligned}(E-mc^2)\,\omega-c\vec{\sigma}\vec{p}\omega'=0,\\ -c\vec{\sigma}\vec{p}\omega+(E+mc^2)\,\omega'=0.\end{aligned}\right\} \tag{26.16}$$

Отличные от нуля решения получаются, если определитель системы обращается в нуль:

$$E^2-m^2c^4-c^2(\vec{\sigma}\vec{p})^2=0.$$

Отсюда определяем энергию частицы:

$$E_{1,2}=\pm\varepsilon, \tag{26.17}$$

где

$$\varepsilon=c\sqrt{p^2+m^2c^2}.$$

В результате, как и в § 25, мы приходим к двум типам решений для свободных частиц:

$$\psi_{(+)}=u_1e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t)},\quad \psi_{(-)}=u_2e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}+\varepsilon t)}. \tag{26.18}$$

Решения (26.18) интерпретируем как зарядово-сопряженные состояния частицы и античастицы — электрона и позитрона.

Возвращаясь к системе линейных однородных уравнений (26.16), рассматриваем ее при $E_1=\varepsilon$ и $E_2=-\varepsilon$. В таком случае находятся два решения:

$$\left.\begin{aligned}\omega=-\frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{\varepsilon+mc^2}\,\omega',\\ \omega'=\frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{\varepsilon+mc^2}\,\omega.\end{aligned}\right\} \tag{26.19}$$

Введем теперь конкретное обозначение для постоянных матриц-столбцов $\omega$:

$$\omega=\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix},\quad \omega'=\begin{pmatrix}C_3\\ C_4\end{pmatrix},$$

а также выберем направление оси $Oz$ по импульсу свободной частицы. После вычислений скалярных произведений в формуле (26.19) и подстановок в матрицу $u$ имеем для нее два решения:

$$u_1=\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\\ C_1\frac{cp_z}{\varepsilon+mc^2}\\ -C_2\frac{cp_z}{\varepsilon+mc^2}\end{pmatrix},\quad u_2=\begin{pmatrix}-C_3\frac{cp_z}{\varepsilon+mc^2}\\ C_4\frac{cp_z}{\varepsilon+mc^2}\\ C_3\\ C_4\end{pmatrix} \tag{26.20}$$

Матрица $u_1$ относится к электрону, а $u_2$ — к позитрону. Итак, решения (26.18) выражают состояния электрона и позитрона. Это четырехкомпонентные спиноры, описывающие спиновое состояние частиц.

Рассмотрим приближенное решение для квазирелятивистского случая. Тогда $p_z \ll mc$, $\varepsilon \ll mc^2$ и $\frac{cp_z}{\varepsilon + mc^2} \simeq 0$. Поэтому матрицы $u_1$ и $u_2$ имеют вид знакомых нам спиновых функций (см. § 13):

$$u_1 = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix}. \tag{26.21}$$

Подведем итог. Найденные решения (26.18) уравнения Дирака для свободной квазирелятивистской частицы являются (если отбросить нули в матрицах-столбцах (26.21)) двухкомпонентными функциями, так как содержат сомножители — одностолбцовые матрицы:

$$u_1 = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \begin{pmatrix} C_3 \\ C_4 \end{pmatrix}. \tag{26.22}$$

Так выявилась дополнительная степень свободы для состояний частицы с заданными характеристиками $m$ и $\vec{p}$. Она учитывается спиновой функцией $u$.

Требуя выполнения условия нормировки спиновых функций:

$$u_1^+ u_1 = u_2^+ u_2 = 1,$$

получим

$$C_1^* C_1 + C_2^* C_2 = 1, \quad C_3^* C_3 + C_4^* C_4 = 1,$$

что позволяет выбрать базисные спиновые функции электрона и позитрона в виде

$$u_1\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \; u_2\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \; u_1\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \; u_2\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{26.23}$$

Если воспользоваться введенными в § 13 операторами $\hat{S}$ и $\hat{S}_z$, то легко убедиться, что в состояниях со спиновыми функциями $u_1\left(\frac{1}{2}\right)$, $u_2\left(\frac{1}{2}\right)$ полуцелый спин электрона или позитрона направлен по оси $Oz$, совпадающей с направлением импульса, а в состояниях со спиновыми функциями $u_1\left(-\frac{1}{2}\right)$, $u_2\left(-\frac{1}{2}\right)$ спин направлен против оси. В более общем случае состояний со спиновыми функциями (26.21) вероятность той или иной ориентировки спина электрона определяется соответственно величинами $C_1^* C_1$, $C_2^* C_2$, позитрона — $C_3^* C_3$, $C_4^* C_4$.

Рассмотрим оператор

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \vec{p},$$

где $\vec{\sigma}$ — векторное обозначение двухрядных матриц Паули.

Этот оператор коммутирует с оператором $\hat{H}$ (26.2). Для свободного движения импульс сохраняется, следовательно, сохраняется и второй множитель, оператор которого

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \tag{26.24}$$

является оператором проекции спина. Собственные значения оператора $\hat{S}_z$ известны. Поскольку

$$\hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix},$$

то проекция спина на ось $Oz$ принимает значения: $\pm\frac{\hbar}{2}$. Собственными для операторов $\hat{S}_z$ и $\hat{S}^2=\hat{S}_x^2+\hat{S}_y^2+\hat{S}_z^2$ являются функции

$$u_1\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad u_1\left(-\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\quad u_2\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad u_2\left(-\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

Соответствующие им значения $S_z$ таковы: $\frac{\hbar}{2}$, $-\frac{\hbar}{2}$, $\frac{\hbar}{2}$, $-\frac{\hbar}{2}$.

Нетрудно также найти модуль спина:

$$S=\frac{\hbar\sqrt{3}}{2}.$$

Если электрон и позитрон рассматриваются в отдельности, то удобнее пользоваться двухрядными матрицами:

$$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma},\quad \hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad \hat{S}^2=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

с собственными функциями (26.23).

Полезно заметить, что в общем случае спиновые функции $u$ — четырехрядные матрицы.

Свободное волновое поле, соответствующее электронам и позитронам, выражается линейной суперпозицией решений (26.18), где спиновые множители есть матрицы (26.20):

$$\psi=A_1u_1e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t)}+A_2u_2e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}+\varepsilon t)}. \tag{26.25}$$

Волновая функция (26.25) несет информацию о квантах поля — электронах и позитронах, их импульсах, энергиях, спинах.

## § 27. КВАНТОВАННОЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ

**27.1. Представление электромагнитного поля в виде системы гармонических осцилляторов.** В самом начале курса квантовой механики были введены важные формулы для энергии и импульса квантов электромагнитного поля:

$$\varepsilon=\hbar\omega,\quad \vec{p}=\hbar\vec{k}. \tag{27.1}$$

Однако последовательную квантовую теорию электромагнитного поля мы до сих пор не рассматривали. Подход к электромагнитному полю как совокупности квантовых осцилляторов, обсуждавшийся выше, в § 22, раскрыл физическую идею квантования поля, но математически не был разработан. Поэтому продолжим сейчас анализ воп-

роса о квантованном поле и познакомимся с элементами квантовой электродинамики.

Квантовая электродинамика тесно связана с исходной для нее математической процедурой квантования макроскопических характеристик электромагнитного поля. Эта процедура основывается на принципе соответствия между классической и квантовой физикой, дополненном некоторыми новыми постулативными положениями. В нашем курсе изучение квантовой электродинамики ограничивается знакомством с квантованием поля.

В классической электродинамике свободное электромагнитное поле описывается волновым уравнением для векторного потенциала (см. ч. III, § 4):

$$\Delta\vec{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2}=0. \tag{27.2}$$

Векторы поля $\vec{E}$ и $\vec{B}$ находятся с помощью соотношений

$$\vec{E}=-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t},\quad \vec{B}=\operatorname{rot} A. \tag{27.3}$$

Энергия и импульс электромагнитного поля выражаются через напряженность $\vec{E}$ и индукцию $\vec{B}$ с помощью формул

$$W=\frac{1}{2}\int\left(\varepsilon_0E^2+\frac{1}{\mu_0}B^2\right)dV, \tag{27.4}$$

$$\vec{p}=\int[\varepsilon_0\vec{E}\,\vec{B}]\,dV. \tag{27.5}$$

Мы будем рассматривать поле в кубе с ребром $L$, которое может быть как угодно большим. На векторный потенциал накладывается условие периодичности:

$$\vec{A}(x+L,\ y+L,\ z+L)=\vec{A}(x,\ y,\ z). \tag{27.6}$$

Такой прием позволяет без уменьшения общности рассуждений применять разложение полевых величин в ряды Фурье вместо интегралов Фурье, что упрощает выкладки.

Разложим векторный потенциал $\vec{A}$ (в кубе $L$) в обобщенный ряд Фурье по функциям $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}$, где $\vec{k}$ назовем волновым вектором. Из условия (27.6) следует

$$k_x=\frac{2\pi}{L}n_1,\ k_y=\frac{2\pi}{L}n_2,\ k_z=\frac{2\pi}{L}n_3,\ n_{1,2,3}=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \ldots$$

Кроме того, учтем, что электромагнитное поле поперечно, т. е. вектор $\vec{A}$ перпендикулярен вектору $\vec{k}$. Вводя два единичных вектора поляризации $\vec{l}_{\alpha\vec{k}}$, где $\alpha=1,2$, перпендикулярные $\vec{k}$ и друг другу, запишем разложение:

$$\vec{A}=\sum_{\alpha=1}^{2}\sum_{\vec{k}}\vec{l}_{\alpha\vec{k}}\left(A_{\vec{k}\alpha}e^{i\vec{k}\vec{r}}+A^*_{\vec{k}\alpha}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right). \tag{27.7}$$

(Благодаря комплексному сопряжению слагаемых в круглых скоб-

ках вектор $\vec{A}$ всегда действителен, как это и должно быть для электромагнитного поля.)

Поскольку выражение (27.7) является решением уравнения поля (27.2), то коэффициенты разложения $A_{\vec{k}\alpha}$ должны удовлетворять равенству, получающемуся при подстановке (27.7) в (27.2):

$$\frac{\partial A_{\vec{k}\alpha}}{\partial t}+ickA_{\vec{k}\alpha}=0. \tag{27.8}$$

Решая дифференциальное уравнение (27.8), получаем

$$A_{\vec{k}\alpha}=A^{(0)}_{\vec{k}\alpha}\,e^{-ickt}, \tag{27.9}$$

где $A^{(0)}_{\vec{k}\alpha}$ — постоянные числа. Совокупность величин $A_{\vec{k}\alpha}$ определяет поле в любой точке пространства в некоторый фиксированный момент времени, а с учетом (27.9) — в любой момент времени $t$.

В самом деле, подставляя выражения (27.9) в ряд (27.7) и вводя обозначение $ck=\omega$, получим разложение векторного потенциала поля по плоским волнам:

$$\vec{l}_{\alpha\vec{k}}A^{(0)}_{\vec{k}\alpha}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)},\quad \vec{l}_{\alpha\vec{k}}A^{*(0)}_{\vec{k}\alpha}e^{-i(\vec{k}\vec{r}+\omega t)},$$

рассматривавшееся в ч. III, § 4 как решение волнового уравнения.

Временная зависимость $\vec{A}$ в формуле (27.7) в явном виде отсутствует: она перенесена с уравнения (27.2) на уравнение (27.8). Это предпринято для новых интерпретаций величин $A_{\vec{k}\alpha}$ и уравнения (27.8).

Выразим основные измеримые характеристики поля через величины $A_{\vec{k}\alpha}$:

$$\vec{E}=ic\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\vec{l}_{\alpha\vec{k}}\,k\,(A_{\vec{k}\alpha}\,e^{i\vec{k}\vec{r}}-A^{*}_{\vec{k}\alpha}\,e^{-i\vec{k}\vec{r}}), \tag{27.10}$$

$$\vec{B}=i\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}[\vec{k}\,\vec{l}_{\alpha\vec{k}}](A_{\vec{k}\alpha}\,e^{i\vec{k}\vec{r}}-A^{*}_{\vec{k}\alpha}\,e^{-i\vec{k}\vec{r}}), \tag{27.11}$$

$$W=2\,\frac{L^3}{\mu_0}\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}k^2\,A_{\vec{k}\alpha}\,A^{*}_{\vec{k}\alpha}, \tag{27.12}$$

$$\vec{p}=2\,\frac{L^3}{\mu_0 c}\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}k\vec{k}A_{\vec{k}\alpha}\,A^{*}_{\vec{k}\alpha}. \tag{27.13}$$

При расчете энергии и импульса использовалась для каждой проекции формула

$$\int_0^L e^{i(k_\alpha-k'_\alpha)x}dx=L\delta_{k_\alpha k'_\alpha}.$$

Выполним замену параметров $A_{\vec{k}\alpha}$ на новые параметры $a_{\vec{k}\alpha}$ (смысл их выяснится из дальнейшего):

$$A_{\vec{k}\alpha}=\sqrt{\frac{\mu_0\hbar c}{2kL^3}}\,a_{\vec{k}\alpha}. \tag{27.14}$$

С помощью подстановки (27.14) могут быть преобразованы выражения для всех полевых характеристик. В частности, имеем

$$W=\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\frac{\hbar\omega_k}{2}(a_{\vec{k}\alpha}\,a^{*}_{\vec{k}\alpha}+a^{*}_{\vec{k}\alpha}\,a_{\vec{k}\alpha}), \tag{27.15}$$

$$\vec{p}=\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\frac{\hbar\vec{k}}{2}\left(a_{\vec{k}\alpha}\,a^{*}_{\vec{k}\alpha}+a^{*}_{\vec{k}\alpha}\,a_{\vec{k}\alpha}\right), \tag{27.16}$$

где $\omega=ck$.

Для интерпретации полученных выражений полевых величин через параметры $a_{\vec{k}\alpha}$ и $a^{*}_{\vec{k}\alpha}$ рассмотрим формулу энергии классического гармонического осциллятора (см. § 6):

$$\varepsilon=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}. \tag{27.17}$$

Выполним подстановки, сводящие это выражение к сумме (27.15):

$$\xi=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\quad \eta=\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega m}}p,\quad a=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+i\eta),\quad a^{*}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-i\eta). \tag{27.18}$$

Получим

$$\varepsilon=\frac{\hbar\omega}{2}\left(aa^{*}+aa^{*}\right). \tag{27.19}$$

Величины $a$ и $a^{*}$, определяемые соотношениями (27.18), могут быть выбраны в качестве новых переменных вместо $p$ и $x$ для описания движения механического осциллятора, как это видно из формулы (27.19).

*Сравнивая формулы (27.19) и (27.15), имеем основание уподобить электромагнитное поле бесконечной совокупности гармонических осцилляторов.* Соответственно совокупность гармонически зависящих от времени переменных $a_{\vec{k}\alpha}$ и $a^{*}_{\vec{k}\alpha}$ можно взять в качестве нормальных координат электромагнитного поля (см. ч. I, § 26).

Итак, макроскопическое электромагнитное поле можно рассматривать как систему с бесконечным числом степеней свободы. Каждой степени свободы соответствует монохроматическое гармоническое колебание. Все полевые величины выражаются через нормальные координаты системы: $a_{\vec{k}\alpha}$ и $a^{*}_{\vec{k}\alpha}$.

Такая интерпретация поля позволяет перекинуть мост между классическим и квантовым описаниями поля.

**27.2. Квантовые электромагнитные поля.** Если заменить теперь совокупность классических осцилляторов в выражении (27.15) на квантовые осцилляторы, то мы перейдем к квантовому электромагнитному полю. Основная физическая идея — постулат квантования поля — именно в этом и состоит: *квантовое поле уподобляется системе квантовых осцилляторов, каждый из которых соответствует гармонической составляющей макроскопического поля с волновым вектором $\vec{k}$ и поляризацией $\alpha$ в разложении (27.7).* Поэтому стационарные состояния осцилляторов определяют стационарное состояние поля, дискретные уровни энергии осцилляторов соответствуют возбуждениям, или квантам поля. Энергия и импульс кванта определяются формулами (27.1), а число квантов каждого сорта $(\vec{k},\ \alpha)$ — квантовым числом $n_{\vec{k}\alpha}$, задающим состояние соответствующего осциллятора.

Исходя из этих положений, мы можем сразу написать формулу для энергии стационарных состояний электромагнитного поля:

$$W=\sum_{\alpha}\sum_{k}\hbar\omega_k\left(n_{\vec{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right), \tag{27.20}$$

где величины $n_{\vec{k}\alpha}$ принимают значения 0, 1, 2, 3, ...

Однако ни функций состояния, ни квантовых уравнений для поля, ни способа получения значений других параметров квантового поля (например, напряженности $\vec{E}$, индукции $\vec{B}$) мы пока что не имеем. Математическая процедура квантования поля и направлена на заполнение этих пробелов.

Прежде всего уравнение Максвелла в форме (27.2) для векторного потенциала поля $\vec{A}(x, t)$ можно рассматривать как *истинное квантово-релятивистское уравнение, а потенциал — как функцию состояния электромагнитного поля в координатном представлении.* Разложение (27.7) есть общее решение квантово-релятивистского уравнения для стационарного случая.

Отделение координатной зависимости в функции состояния от временной приводит к динамическому уравнению (27.8) для величин $A_{\vec{k}\alpha}$.

Подчеркнем, что речь идет о *функции состояния поля*, а не отдельной частицы и смысл ее раскрывается не в определении местоположения микрочастицы в пространстве, а в определении важнейших параметров поля — его энергии, импульса, векторов напряженности и индукции — с учетом квантовых особенностей или микроструктуры поля.

Но координатное представление функции состояния для квантового поля неудобно, ибо, как об этом говорилось ранее, в § 25, п. 1, локализация фотона в определенной точке пространства невозможна. Поскольку поле полностью описывается величинами $a_{\vec{k}\alpha}$ и $a^{*}_{\vec{k}\alpha}$ (по ним можно восстановить вид разложения (27.7)), эти величины можно принять за новые переменные функции состояния вместо старых $\vec{r}$ и $t$. Такое выражение функции состояния называется импульсным представлением. Оно достигается перечислением всех величин $a_{\vec{k}\alpha}$, $a^{*}_{\vec{k}\alpha}$, помещаемых либо в матрицу-столбец:

$$|a_{\vec{k}\alpha}>=\begin{pmatrix} a_{\vec{k}_1\alpha} \\ a_{\vec{k}_2\alpha} \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{27.21}$$

либо в матрицу-строку:

$$<a_{\vec{k}\alpha}|=(a^{*}_{\vec{k}_1},\ a^{*}_{\vec{k}_2},\ \ldots), \tag{27.22}$$

причем $|a_{\vec{k}\alpha}>^{+}=<a_{\vec{k}\alpha}|$.

Нетрудно найти и квантовое уравнение поля в импульсном представлении. Выполняя в уравнении (27.8) подстановку (27.14), получаем для величин $a_{\vec{k}\alpha}$:

$$i\hbar\frac{\partial a_{\vec{k}\alpha}}{\partial t}=cp_k a_{\vec{k}\alpha}.$$

Отсюда следует и уравнение для функций состояния:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a_{\vec{k}\alpha}>=cp_k|a_{\vec{k}\alpha}>. \tag{27.23}$$

Уравнение (27.23) имеет вид уравнения Шредингера с гамильтонианом:

$$\hat{H} = cp_k,$$

выражающим оператор энергии отдельного фотона через его импульс $p_k$.

Поэтому уравнение (27.23) называют уравнением Шредингера для фотона. Однако роль его в квантовой теории поля несравненно скромнее, нежели роль уравнения Шредингера для нерелятивистской частицы: теперь из уравнения только и вытекает гармоническая зависимость функции состояния от времени. Решая уравнение (27.23), получаем

$$|a_{\vec{k}\alpha}> = |a^{(0)}_{\vec{k}\alpha}> e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}, \tag{27.24}$$

где $\varepsilon_k = cp_k$, а $a^{(0)}_{\vec{k}\alpha}$ — всевозможные комплексные числа. Различные их комбинации задают различные состояния поля независимо от уравнения (27.23).

Новое представление распространяется не только на функции состояния, но и на другие характеристики поля, которые в квантовой теории выражаются через соответствующие операторы.

Начнем с энергии. Оператор энергии электромагнитного поля получим по принципу соответствия из формулы (27.15), заменяя в ней величины $a_{\vec{k}\alpha}$ и $a^*_{\vec{k}\alpha}$ операторами $\hat{a}_{\vec{k}\alpha}$ и $\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}$:

$$H_{\text{поля}} = \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar\omega_k}{2} (\hat{a}_{\vec{k}\alpha}\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha} + \hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}\hat{a}_{\vec{k}\alpha}). \tag{27.25}$$

Вид и свойства операторов $\hat{a}_{\vec{k}\alpha}$ и $\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}$ нам пока что неизвестны. Можно только сказать, что это квадратные матрицы с бесконечным числом элементов, выраженных через переменные $a_{\vec{k}\alpha}$ и $a^*_{\vec{k}\alpha}$. С учетом соотношений (27.24) заключаем, что мы имеем дело с операторами, гармонически зависящими от времени.

Чтобы установить свойства операторов $\hat{a}_{\vec{k}\alpha}$ и $\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}$, сопоставим формулу энергии стационарного состояния квантового поля (27.15) с гамильтонианом (27.25). Гамильтониан поля должен для функций стационарных состояний иметь собственные значения (27.20):

$$\hat{H}|a_{\vec{k}\alpha}> = W|a_{\vec{k}\alpha}>,$$

или в подробной записи:

$$\left\{\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}_{\vec{k}\alpha}\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha} + \hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}\hat{a}_{\vec{k}\alpha})\right\}|a_{\vec{k}\alpha}> = \left\{\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}} \hbar\omega_k\left(\hat{n}_{\vec{k}\alpha} + \frac{1}{2}\right)\right\}|a_{\vec{k}\alpha}>.$$

Равенство будет выполняться, если операторы $\hat{a}$ обладают следующими свойствами:

$$[\hat{a}_{\vec{k}\alpha},\ \hat{a}^+_{\vec{k}'\alpha'}] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\alpha\alpha'}, \tag{27.26}$$

а произведение операторов:

$$\hat{n}_{\vec{k}\alpha} = \hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}\hat{a}_{\vec{k}\alpha} \tag{27.27}$$

есть оператор, собственные значения которого в стационарных состояниях поля образуют последовательность чисел: $n=0, 1, 2, 3, \ldots$

В самом деле, используя свойство (27.26) и определение (27.27), вместо обсуждаемого равенства имеем

$$\left\{\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\hbar\omega_k\left(\hat{n}_{\vec{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right)\right\}|a_{\vec{k}\alpha}>=\left\{\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\hbar\omega_k\left(n_{k\alpha}+\frac{1}{2}\right)\right\}|a_{\vec{k}\alpha}>.$$

Оператор $\hat{n}_{\vec{k}\alpha}$ носит название оператора числа квантов поля. (Понятно, что он действует в функции состояния на переменные с индексами $\vec{k}$ и $\alpha$.) Таким образом, стационарные состояния поля есть состояния поля с определенным числом квантов каждого сорта $(\vec{k}, \alpha)$.

Переходя к импульсному представлению, запишем операторы других величин, характеризующих поле:

$$\vec{p}=\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\hbar\vec{k}\left(\hat{n}_{\vec{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right), \tag{27.28}$$

$$\hat{\vec{A}}=\sqrt{\frac{\mu_0\hbar c}{2L^3}}\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\frac{\vec{l}_{\alpha\vec{k}}}{\sqrt{k}}(\hat{a}_{\vec{k}\alpha}e^{i\vec{k}\vec{r}}+\hat{a}^{+}_{\vec{k}\alpha}e^{-i\vec{k}\vec{r}}), \tag{27.29}$$

$$\hat{\vec{E}}=ic\sqrt{\frac{\mu_0\hbar c}{2L^3}}\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\frac{k\vec{l}_{\alpha\vec{k}}}{\sqrt{k}}(\hat{a}_{\vec{k}\alpha}e^{i\vec{k}\vec{r}}-\hat{a}^{+}_{\vec{k}\alpha}e^{-i\vec{k}\vec{r}}), \tag{27.30}$$

$$\hat{\vec{B}}=i\sqrt{\frac{\mu_0\hbar c}{2L^3}}\sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\frac{|\vec{k}\vec{l}_{\alpha\vec{k}}|}{\sqrt{k}}(\hat{a}_{\vec{k}\alpha}e^{i\vec{k}\vec{r}}-\hat{a}^{+}_{\vec{k}\alpha}e^{-i\vec{k}\vec{r}}). \tag{27.31}$$

Анализируя формулу (27.28), замечаем, что в стационарных состояниях импульс поля принимает определенные значения и, как и энергия, от времени не зависит. Что же касается векторного потенциала поля $\vec{A}$, напряженности $\vec{E}$ и индукции $\vec{B}$, то из формул (27.29) ... (27.31) видна, во-первых, зависимость этих величин от времени, содержащаяся согласно соотношениям (27.24) в операторах $\hat{a}$. Во-вторых, поскольку $\hat{a}_{\vec{k}\alpha}$ и $\hat{a}^{+}_{\vec{k}\alpha}$ не коммутируют между собой, эти величины не коммутируют с $\hat{n}_{\vec{k}\alpha}$. Следовательно, в стационарных состояниях поле не имеет определенной напряженности и индукции, т. е. поле с определенным числом квантов не может быть однозначно охарактеризовано векторами $\vec{E}$ и $\vec{B}$.

Последняя ситуация характерна, конечно, для микроскопических проявлений поля, когда число квантов невелико. В макроскопических полях с огромным числом квантов разброс собственных значений операторов $\vec{E}$ и $\vec{B}$ невелик по сравнению с их абсолютными величинами, поэтому практически измеряется и фигурирует в теории среднее значение векторов:

$$\vec{E}_{\text{макр}}=<\vec{E}_{\text{квант}}>,\quad \vec{B}_{\text{макр}}=<\vec{B}_{\text{квант}}>. \tag{27.32}$$

На основе формул (27.32) классическая электродинамика предстает как предельный усредненный случай квантовой электродинамики. Поскольку соотношения между квантовыми средними повторяют соотношения между соответствующими операторами, становится

понятной правомерность замены величин в формулах классической физики их операторами при переходе к квантовой (принцип соответствия). Процедура квантования связана, таким образом, с правильным выбором — постулированием — квантовых операторов $\hat{a}$, $\hat{a}^+$, $\hat{n}$.

Далее в теории они широко применяются во всех задачах. В нашем курсе конкретный вид этих операторов не потребовался. Интересующихся можно отослать к фундаментальным курсам [5], [8], [10], [11].

На этом закончим краткий экскурс в квантовую теорию полей элементарных частиц. Мы остановились перед самым важным: взаимодействием полей между собой. Как уже говорилось ранее (см. § 23, п. 4 и § 24, п. 3), основной метод изучения взаимодействия полей состоит в следующем: во втором (или высших) приближении нестационарной теории возмущений рассчитывается вероятность переходов в системе квантовых полей. При этом начальные и конечные состояния полей и есть свободные стационарные состояния с известными функциями. Оператор взаимодействия строится с учетом требований релятивистской инвариантности и вида взаимодействия.

Например, в расчете рассеяния фотонов на электронах (эффект Комптона) задано известными функциями начальные состояния однофотонного и одноэлектронного полей. Конечные состояния этих полей также свободные стационарные, но в функциях включены всевозможные значения энергии и импульса обеих частиц, допустимые законами сохранения. Рассчитываются вероятности различных переходов, вероятности получения в результате взаимодействия нового фотона с различными значениями импульса и энергии. (Интересующимся можно порекомендовать специальную литературу, например [1].)

### Упражнение IX

**1.** Выведите уравнения Дирака (26.5) для всех четырех составляющих спинора $\Psi$ из матричной формы (26.1).

**2.** Получите уравнение непрерывности в дираковской теории.

Указание. Уравнение Дирака умножить слева на $\Psi^+$, а комплексно-сопряженное — справа на $\Psi$ и вычесть почленно. Окончательно

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi)=c\nabla\,(\Psi^+\vec{\alpha}\Psi)$$

**3.** Рассмотрите развернутые выражения для плотности вероятности и плотности потока вероятности:

$$\vec{j}=c\Psi^+\vec{\alpha}\Psi.$$

**4.** Получите развернутое выражение для $\nabla\vec{j}$.

**5.** Используя матричные уравнения для спиновых функций:

$$Eu=[c\vec{\alpha}\vec{p}+mc^2\beta]\,u,$$

получите уравнения для двухрядных спиновых функций в выражении

$$u=\begin{pmatrix}\omega\\ \omega'\end{pmatrix}.$$

Ответ.

$$E\omega=c\vec{\sigma}\vec{p}\omega'+mc^2\omega,$$
$$E\omega'=c\vec{\sigma}\vec{p}\omega-mc^2\omega'.$$

## § 28. ВНУТРЕННИЕ СИММЕТРИИ И ИЗОТОПИЧЕСКИЙ СПИН

**28.1. Понятие о внутренней симметрии и ее нарушении.** Знакомя читателя с началами релятивистской квантовой теории (гл. IX), мы подчеркивали, что здесь существенно изменяется смысл волновой функции. Волновое поле $\psi$ описывает такие свойства свободной элементарной частицы, как импульс, спин, четность, но не положение ее в пространстве.

В этой связи характерна спиновая функция — сомножитель при координатной (см. § 26, п. 3). Она не зависит от координат микрочастицы и является матрицей-столбцом, дающим ответ на вопрос о величине модуля и проекции спина. Но известно, что элементарные частицы обладают рядом не принимаемых нами ранее в расчет параметров, в частности изотопическим спином, странностью или гиперзарядом и др. Оказывается, что описание ряда внутренних свойств элементарных частиц, таких, как масса, изоспин, странность и др., возможно по общей схеме применения операторов и волновых функций, если добавить к координатной части, кроме спинового, дополнительный матричный множитель.

Современный метод теоретического изучения свойств элементарных частиц основан на сопоставляемых каждому виду частиц волновых полях, понятии о внутренней симметрии и ее нарушении. Чтобы уяснить новые идеи этого метода, начнем с того, что хорошо известно, но осветим это известное под необычным, необходимым нам для дальнейшего, углом зрения.

Стационарные состояния атома водорода определяются параметрами протона и электрона и взаимодействием между ними. Взаимодействие складывается из нескольких последовательно убывающих частей. Главная — притяжение электрона к ядру с потенциальной энергией $\hat{U}_0=-\varkappa\frac{e^2}{r}$. Много меньше энергия взаимодействия спинового магнитного момента электрона с магнитным полем атома, оператор которого можно обозначить через $\hat{V}$. (Остальные слагаемые не принимаем во внимание.)

Пусть проведен расчет энергии атома в некотором стационарном состоянии с учетом только основного взаимодействия $\hat{U}_0$, получено значение $E_0$. В таком случае в принципе можно определить массу атома как системы, состоящей из ядра и электронов:

$$m_{\text{а}}=\left(m_{\text{я}}+m_{\text{э}}+\frac{E_0}{c^2}\right).$$

(В данном случае $E_0<0$ и масса атома меньше суммы масс ядра и электрона.)

При расчете игнорировалось магнитное взаимодействие, поэтому энергия атома от ориентации спина электрона не зависит. Последнее важное для нас обстоятельство можно выразить в следующей форме: внутреннее взаимодействие в системе обладает симметрией (внутренняя симметрия) относительно состояний с разной ориентацией спинов. Все такие различные стационарные состояния есть состояния с одной и той же энергией и массой системы.

А теперь учтем магнитное взаимодействие $\widehat{V}$. Оно нарушает внутреннюю симметрию атома, заключающуюся в независимости $\widehat{U}_0$ от ориентации спина, так как дает вклады — поправки к энергии $E_0$, величина которой зависит от этой ориентации. Например, могут получиться две поправки $\varepsilon_1$ и $\varepsilon_2$, а в многоэлектронных атомах — $\varepsilon_1$, $\varepsilon_2$, $\varepsilon_3$ и т. д. Уровень энергии атома оказывается разделенным на подуровни. Несколько близких линий составляют *мультиплет* в энергетическом спектре атома.

Если произвести расчет массы атома, то соответственно получим несколько близких значений:

$$m_i=\left(m_я+m_э+\frac{E_0}{c^2}+\frac{\varepsilon_i}{c_2}\right).$$

Образование мультиплета масс системы, состоящей из ядра и электронов, в терминах симметрии взаимодействия и ее нарушения можно выразить так: симметрия основной части взаимодействия, формирующего состояние системы, нарушена, что и привело к спектру — мультиплету масс вместо одного значения массы.

Далее перенесем полученные результаты с атомов на элементарные частицы. Мы исходим из предложения, что элементарная частица есть система, параметры которой формируются за счет внутреннего взаимодействия. Основная часть взаимодействия обладает некоторой симметрией, так что, например, состояния системы, описываемые волновыми функциями $n$ и $p$, по отношению к этому взаимодействию эквивалентны, массы частиц $n$ и $p$ одинаковы. Но еще имеется меньшее, нарушающее симметрию, взаимодействие. Оно приводит к небольшому различию масс системы в состояниях $n$ и $p$.

*Ведущая идея современной теории элементарных частиц и состоит в том, что их группы рассматриваются как состояния одной и той же системы-частицы, близкие благодаря симметрии внутреннего взаимодействия, но и различные за счет нарушения этой симметрии другим взаимодействием (или частью основного).* Эта идея внутренней симметрии и ее нарушения оказалась особенно плодотворной в поисках единых начал для объяснения всего многообразия элементарных частиц.

Проявление внутренней симметрии в мире известных элементарных частиц можно установить путем сравнения их параметров. Для этого надо усмотреть в многообразии частиц группы — мультиплеты, близкие по массе. Обратимся к адронам.

Прежде всего бросается в глаза близость масс протона и нейтрона:

$$m_p = 938{,}280 \text{ МэВ}, \quad m_n = 939{,}573 \text{ МэВ}.$$

Учитывая совпадающие значения спина и четности $\left(\frac{1}{2}^+\right)$, барионного и других квантовых чисел, кроме электрического заряда, можно говорить о дублете протон — нейтрон.

Аналогично выделяются: триплет мезонов $\pi^+$, $\pi^0$, $\pi^-$ $(0^-)$, дублет мезонов $K^+$, $K^0$ $(0^-)$, триплет барионов $\Sigma^+$, $\Sigma^0$, $\Sigma^-\left(\frac{1}{2}^+\right)$ и другие мультиплеты с небольшим числом частиц и близкими массами.

Существуют и более обширные группы, так называемые *супермультиплеты*. Важнейший октет барионов, в который входят уже упомянутые дублет нуклонов и триплет сигма-гиперонов, таков:

$$\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-, \Lambda, p, n, \Xi^-, \Xi^0\left(\frac{1}{2}^+\right). \tag{28.1}$$

Есть декуплет барионов:

$$\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-, \overset{*}{\Sigma}{}^+, \overset{*}{\Sigma}{}^0, \overset{*}{\Sigma}{}^-, \overset{*}{\Xi}{}^-, \Xi^0, \Omega^-\left(\frac{3}{2}^+\right), \tag{28.2}$$

а также октет мезонов:

$$\pi^+, \pi^0, \pi^-, K^+, K^0, K^-, \tilde{K}^0, \eta \tag{28.3}$$

и некоторые другие.

Массы частиц в супермультиплетах различаются значительно больше. Например, в декуплете (28.2) они от 1000 до 2000 МэВ. Тем не менее налицо объединение, которое можно отнести к некоторой внутренней симметрии. Адроны в мультиплете надо считать разными состояниями одной и той же частицы-системы.

Объединение частиц в мультиплеты и супермультиплеты на языке квантовой механики объясняется в рамках концепции внутренней симметрией и ее нарушением следующим образом: основное взаимодействие, обусловливающее состояние адрона, обладает некоторой симметрией, выраженной в соответствующем преобразовании. (Преобразование отнюдь не относится к координатам и времени и не является лоренцовым.) Состояние описывается функциями, в общем случае называемыми *спинорами* этого преобразования и имеющими вид одностолбцовых матриц, аналогичных спиновым. Например, для дублетов они двухрядны:

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \xi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \xi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{28.4}$$

Здесь $\xi_1$ и $\xi_2$ — комплексные числа, а $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ — базисные состояния дублета.

Число строк функции или число базисных функций совпадает с числом частиц в мультиплете. Так, для дублета протон — нейтрон

их две, для триплета π-мезонов — три и т. д. Базисные функции выражают отдельные частицы мультиплета, например:

$$p \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad n \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{28.5}$$

(Функция обозначена тем же символом, что и частица.) Они являются элементами некоторого линейного пространства, преобразующегося матрицей $U$ подобно тому, как геометрические векторы преобразуются матрицей направляющих косинусов углов поворота осей координат, скаляры и векторы уравнения Клейна — матрицей Лоренца, а спиноры Дирака — производной от нее матрицей.

Далее нужно принять в расчет внутреннее взаимодействие, определяющее параметры частиц мультиплета. Оно выражается в теории через оператор Гамильтона, состоящий из главной и дополнительной частей:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}.$$

Первое слагаемое не изменяется при преобразовании матрицы $U$, т. е. обладает симметрией по отношению к преобразованию $U$; является инвариантом преобразования. Поэтому основная часть энергии (массы) частиц, определяемая первым слагаемым, одинакова для всех базисных состояний. Это, например, одинаковые для дублета величины $E_p$, $E_n$.

А вот второе слагаемое, $\hat{V}$, такой симметрией не обладает и дает различные вклады в энергию: $\varepsilon_p$, $\varepsilon_n$.

Таким образом, с учетом нарушения симметрии массы протона и нейтрона не равны: $m_p \neq m_n$.

Преобразование, отражающее внутреннюю симметрию частиц относительно основного взаимодействия, несет в себе важную информацию о мультиплете — числе его компонент, сохраняющихся величинах, параметрах, различающих отдельные состояния. В современной теории элементарных частиц найдено несколько таких преобразований, соответствующих реальным мультиплетам.

**28.2. Унитарные симметрии.** Изотопический спин. Чтобы учесть внутреннюю симметрию элементарной частицы, следует ввести дополнительный сомножитель в ее волновую функцию. Это уже делалось выше для учета спина. Теперь продолжаем детализацию состояния свободной частицы, включив в рассмотрение не только ее движение в пространстве, четность и спин, но и некоторые внутренние параметры:

$$\psi = \varphi(x, y, z, t)\, u\xi. \tag{28.6}$$

Здесь $u$ — спиновая функция, задающая модуль и ориентацию спина, а $\xi$ — функция, описывающая внутреннее состояние частицы, по которой можно будет определить новые параметры ее состояния.

Ниже мы рассматриваем функцию $\xi$ отдельно, независимо от первых сомножителей. Ставим основную задачу — отыскать для функции $\xi$ преобразование $U$, отражающее внутреннюю симметрию. Вместе с ним определяется и вид $\xi$.

Считая $U$ линейным преобразованием, имеем дело с некоторыми квадратными матрицами — число столбцов равно числу строк, зависит от некоторых комплексных параметров $\alpha$.

С математической точки зрения совокупность преобразований $U(\alpha)$ является группой. Мы не сможем здесь опираться на теорию групп, что, вообще говоря, в этой области физики необходимо. Но групповую терминологию используем.

В соответствии с общей концепцией описания микросистем с помощью волновых функций информация о физическом состоянии — об измеряемых параметрах — дается квадратом модуля волновой функции, в примере дублетов — величиной

$$\tilde{\xi}\xi=(\xi_1^*, \xi_2^*)\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}=\xi_1^*\xi_1+\xi_2^*\xi_2. \tag{28.7}$$

Эта величина должна быть инвариантом отыскиваемого преобразования. Матрица $U$ должна обладать свойством, вытекающим из инвариантности произведения (28.7):

$$\tilde{\xi}'\xi'=\tilde{\xi}U^+\cdot U\xi=\tilde{\xi}\xi,$$

откуда

$$U^+U=1, \tag{28.8}$$

где $U^+$ получена из матрицы $U$ заменой строк на столбцы и комплексным сопряжением элементов.

Матрицы, удовлетворяющие равенству (28.8), называются унитарными. Оказывается, что внутренние симметрии отражены в унитарных преобразованиях.

Конкретизируем вид двухрядной унитарной матрицы $U$:

$$U=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix},$$

где $a$, $b$, $c$, $d$ — параметры, принимающие комплексные значения.

Унитарность дает три уравнения, связывающие параметры:

$$a^*a+c^*c=1,\ b^*b+d^*d=1,\ a^*b+c^*d=0.$$

Для дальнейших рассуждений постоянный множитель, который может стоять перед всеми элементами матрицы $U$, существенным не является. Поэтому его следует подобрать, максимально упрощая матрицу $U$. Требуют, чтобы определитель матрицы был равен 1, что дает четвертое уравнение: $ad-bc=1$. В таком случае матрицу $U$ называют *унимодулярной*.

Итак, матрица $U$ зависит от трех вещественных параметров, которые можно выбрать по-разному. Совокупность матриц образует группу преобразований $SU$ (2) для двухрядных спиноров $\xi$, определяемых через базисные с помощью формулы (28.5).

Можно подводить первые итоги. Если адрон есть система, обладающая симметрией $SU(2)$ по отношению к сильному взаимодействию, а электромагнитное взаимодействие нарушает эту симметрию, то существуют дублеты адронов, в которых частицы с различными электрическими зарядами обладают близкими, но различными массами. Такие дублеты действительно существуют, и мы их уже называли. Это дублет протон — нейтрон, дублет $K$-мезонов и др. Но это еще не все, что может дать анализ унитарной симметрии. Очень существенно, что этот анализ приводит к новой величине — квантовому числу, характеризующему частицу в мультиплете; она названа *изотопическим спином*, так как с формально-математической стороны аналогична обычному спину.

Так, для унитарных дублетов изотопическому спину следует приписать полуцелое значение:

$$T=\frac{1}{2}, \tag{28.9}$$

тогда возможные значения его проекции на некоторую выделенную ось (ей присваивают индекс 3) принимают два значения:

$$T_3=\pm\frac{1}{2}. \tag{28.10}$$

Поэтому унитарный дублет — это частица (система) с изотопическим спином $\frac{1}{2}$, проекция которого не влияет на сильное взаимодействие: состояния $T_3=\frac{1}{2}$ и $T_3=\frac{1}{2}$ различны с учетом электромагнитного взаимодействия. Это две разные частицы.

Анализ спектра масс элементарных частиц приводит к изотопическим триплетам и квадруплетам, для которых соответственно $T=1$, $T_3=-1$; 0,1 и $T=\frac{3}{2}$, $T_3=-\frac{3}{2}$,

$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Имеются и синглеты — частицы без изотопических близнецов. Для них $T=0$.

**28.3. Группа преобразований SU (2).** Приведем в общих чертах математический анализ группы $SU(2)$ в связи с физическим применением, о котором говорилось выше.

Для конкретного выбора параметров, т. е. выбора матриц $U$, прибегают к следующему приему. Матрицу записывают в экспоненциальной форме, имея в виду обобщение формулы Эйлера:

$$U=e^{i\Sigma\alpha_k\tau_k}. \tag{28.11}$$

Здесь $\alpha_k$ — вещественные параметры, а $\tau_k$ — новые матрицы (с тем же числом элементов, что и у матрицы $U$), носящие название *генераторов* преобразования $U$. Для бесконечно малых $\alpha=\varepsilon$ имеем разложение в ряд:

$$U=I+i\sum_k \varepsilon_k\tau_k. \tag{28.12}$$

Чтобы $U$ была унитарной матрицей, $\tau$ должны быть эрмитовыми, т. е.

$$\tau_k^+=\tau_k, \tag{28.13}$$

и с нулевым следом.

Теперь нетрудно выбрать генераторы $\tau_k$; можно воспользоваться ранее встречающимися матрицами в формулах (13.10):

$$\tau_1=\sigma_x,\ \tau_2=\sigma_y,\ \tau_3=\sigma_z. \tag{28.14}$$

Вид преобразований найден:

$$U=e^{i\alpha\tau_1}e^{i\beta\tau_2}e^{i\gamma\tau_3}, \tag{28.15}$$

где $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ — вещественные независимые параметры.

С помощью разложения в ряд, учитывая (28.14), (28.15) можно записать в виде произведения трех сомножителей:

$$U_1=\begin{pmatrix}\cos\alpha & i\sin\alpha\\ i\sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix},\ U_2=\begin{pmatrix}\cos\beta & \sin\beta\\ -\sin\beta & \cos\beta\end{pmatrix},\ U_3=\begin{pmatrix}e^{i\gamma} & 0\\ 0 & e^{-i\gamma}\end{pmatrix}. \tag{28.16}$$

Мы нашли исходные в $SU(2)$ преобразования; остается лишь придавать параметрам $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ непрерывно изменяющиеся значения, чтобы получить любую матрицу из группы. Эти преобразования порождают также ряд других, носящих название непроводимых представлений группы $SU(2)$. Прежде всего, согласно формуле (28.7) имеется скаляр преобразований:

$$A=\bar{\xi}\xi,$$

величина, не изменяющаяся при преобразовании $\xi'=U\xi$, т. е.

$$A'=A. \tag{28.17}$$

Это — скалярное представление группы. Соответствующие частицы имеют нулевой изоспин.

Исходный двухстрочный спинор $\xi$ называют спинором первого ранга (скаляр — нулевого). Спиноры высших рангов получаются в результате прямых произведений спиноров первого ранга. Так, для получения элемеитов спинора второго ранга нужно взять все попарные произведения двух спиноров $\xi$ и $\eta$, обозначаемые $\xi\times\eta$:

$$T_{ik}=\xi_i\eta_k. \tag{28.18}$$

Формула преобразования спинора второго ранга очевидиа:

$$T'_{ik}=\sum_n\sum_m U_{in}U_{km}T_{nm}.$$

Она может быть записана с меньшим числом индексов, если ввести новую матрицу — прямое произведение $U\times U$:

$$T'_i=\sum_k (U\times U)_{ik}T_k. \tag{28.19}$$

Далее все физические приложения спиноров связаны с выделением таких групп элементов $T_k$, которые преобразуются в (28.19) независимо от остальных частью матрицы $U\times U$. Это так называемые *неприводимые* представления группы.

Важный в нашем анализе спинор второго ранга, или вектор, получается следующим образом:

$$F_i^k = \xi^k \eta_i \quad (\xi^k = \xi_k^*). \tag{28.20}$$

Это квадратная матрица:

$$F = \begin{pmatrix} \xi^1\eta_1 & \xi^1\eta_2 \\ \xi^2\eta_1 & \xi^2\eta_2 \end{pmatrix}.$$

Пользуясь очевидным равенством

$$F_i^k = \frac{1}{2}\delta_i^k \mathrm{Sp}F + \left(F_i^k - \frac{1}{2}\delta_i^k \mathrm{Sp}F\right),$$

где $\mathrm{Sp}F = \xi^2\eta_1 + \xi^2\eta_2$ — след матрицы, а $\delta_i^k$ — единичная матрица, имеем разложение на два слагаемых:

$$F = \frac{1}{2} I\,(\xi^1\eta_1 = \xi^2\eta_2) + \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\xi^1\eta_1 - \xi^2\eta_2), & \xi^1\eta_2 \\ \xi^2\eta_1, & \frac{1}{2}(\xi^2\eta_2 - \xi^1\eta_1) \end{pmatrix}.$$

Таким образом из $F$ выделился скаляр преобразований — первое слагаемое, а второе слагаемое — матрица с нулевым следом — содержит три независимых элемента и может быть записано в виде столбца, а также через базисные спиноры:

$$B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} = B_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + B_2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B_3\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{28.21}$$

Осталось найти, какой частью матрицы $U^+ \times U$ преобразуется спинор (28.21). Поскольку слагаемые в спиноре второго ранга

$$F = A + B$$

преобразуются независимо, матрица должна иметь блочный вид:

$$U^+ \times U = \begin{pmatrix} U_{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ 0 & U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{pmatrix}. \tag{28.22}$$

Если такой вид ей придан, разбиение на неприводимые представления завершено: скаляр преобразуется с помощью $U_{00}$ (можно положить 1), а вектор $B$ — трехрядной матрицей $U^3$, зависящей, как и исходная $U^2$, от трех параметров.

Векторам унитарного линейного пространства соответствуют частицы с изотопическим спином $T = 1$. Это обсуждавшиеся ранее триплеты.

Чтобы в некоторой мере завершить разговор о группе $SU$ (2), вернемся к очень важному понятию генератора преобразования. Такие генераторы $\tau_1$, $\tau_2$, $\tau_3$ были написаны нами для исходной матрицы $U^2$. Они имеют место и для ее производных, например для $U^3$. Выбор $\tau$ не однозначен, но подчинен общим для группы ограничениям. Так, в случае $SU$ (2)

$$\tau_1\tau_2 - \tau_2\tau_1 = 2i\tau_3,$$

а величина

$$\tau^2 = \tau_1^2 + \tau_2^2 + \tau_3^2$$

является инвариантом того или иного представления группы и характеризует мультиплет частиц в целом.

Для векторного представления стандартный выбор генераторов таков:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{28.83}$$

А теперь перейдем от математики к физике, т. е. свяжем генераторы группы $SU$ (2) с операторами новой физической величины, характеризующей мультиплет в целом и частицы в качестве симметричных состояний в мультиплете. Это изотопический спин, причем его проекции определяются формулами

$$\widehat{T}_1=\frac{1}{2}\tau_1,\ \widehat{T}_2=\frac{1}{2}\tau_2,\ \widehat{T}_3=\frac{1}{2}\tau_3. \tag{28.24}$$

Отсюда следует квадрат модуля:

$$\widehat{T}^2=\widehat{T}_1^2+\widehat{T}_2^2+\widehat{T}_3^2=\sqrt{\frac{3}{4}}\,\mathrm{I}. \tag{28.25}$$

Пользуясь операторными уравнениями $\widehat{T}_1\xi=T_1\xi$ и т. д., легко находим для базисных функций дублета значения проекций изоспина. Если $\xi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, то $T_3=\frac{1}{2}$; если $\xi=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$, то $T_3=-\frac{1}{2}$, модуль изоспина в этих состояниях одинаков: $T=\frac{\sqrt{3}}{2}$.

Для векторного представления (28.23) имеем:

$$\widehat{T}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\tau_1,\ \widehat{T}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\tau_2,$$
$$\widehat{T}_3=\tau_3,\ \widehat{T}^2=2\mathrm{I}.$$

Отсюда следуют проекции изоспина триплета (для базисных его функций):

$$B_3=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\ T_3=-1,$$
$$B_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\ T_3=0,$$
$$B_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\ T_3=1$$

при общем квадрате модуля $T=\sqrt{2}$. Таков, в частности, триплет $\pi$-мезонов $\pi=\begin{pmatrix}\pi^-\\\pi^0\\\pi^+\end{pmatrix}$ и другие триплеты.

**28.4. Понятие о SU(3)-симметрии.** Изотопический спин как параметр, характеризующий внутренние свойства частицы, прочно вошел в теорию: он указывается для адронов вместе с их зарядом, массой, спином, четностью. Для сильных взаимодействий изоспин системы — величина аддитивная и строго сохраняющаяся в замкнутой системе; электромагнитные нарушают сохранение модуля изоспина замкнутой системы (проекция сохраняется). Слабое взаимодействие происходит с нарушением изоспина.

Но изотопическим спином внутренние параметры элементарных частиц не исчерпываются.

В названных выше супермультиплетах массы различаются более значительно, нежели в изотопических. Это указывает на иную, не электромагнитную природу нарушения внутренней симметрии системы, порождающей мультиплет: взаимодействие относится к сильному. Кроме того, супермультиплеты не укладываются в структуру спиноров $SU(2)$. Естественным представляется для анализа этой новой симметрии использовать в качестве исходной трехрядную унитарную матрицу $U$, преобразующую трехкомпонентные спиноры $q$.

В матричной форме преобразование имеет вид:

$$q'=Uq; \tag{28.26}$$

инвариантом для него служит скаляр:

$$\tilde{q}q=q^+q,\ \tilde{q}q=q_1^*q_1+q_2^*q_2+q_3^*q_3. \tag{28.27}$$

Отсюда, в частности, следует, что наряду со спинором следует рассматривать комплексно-сопряженную матрицу-строку:

$$\tilde{q}=(q_1^*,\ q_2^*,\ q_3^*), \tag{28.28}$$

преобразующуюся матрицей $U^+$:

$$\tilde{q}'=\tilde{q}U^+. \tag{28.29}$$

Теперь волновую функцию $q$ следует сопоставить некоторому исходному триплету элементарных частиц, а $\tilde{q}$ — триплету античастиц. Другие мультиплеты получаются по методике, упомянутой ранее в связи с изотопическими. Надо находить все парные произведения компонент исходных спиноров $q$ и $\tilde{q}$ и выделять из них совокупности, преобразующиеся только друг через друга. Это неприводимые представления $SU(3)$. Матрица их преобразования является частью новой матрицы $U^+ \times U$. Выясним отдельные вопросы, касающиеся числа элементов в супермультиплете.

Скаляр преобразований $SU(3)$ — формула (28.27) — соответствует синглету — одной частице без семейства подобных.

Исходные спиноры $q$ и $\tilde{q}$ соответствуют триплетам.

Далее надо рассматривать попарные произведения $q$ и $\tilde{q}$, затем тройные произведения и т. д. и выделять из них самостоятельные части. Число элементов в каждой такой части будет соответствовать возможному супермультиплету.

С помощью теории групп установлена последовательность этих чисел. Включая уже рассмотренные синглет и базисный триплет, имеем 1, 3, 6, 8, 10, 15, 24, 27, 35 и т. д.

Далее нужно попытаться отождествить их с реальными супермультиплетами элементарных частиц. Здесь идея симметрии дополняется кварковой моделью. *Триплет играет особую роль: его компоненты называемые кварками, оказываются составляющими частями всех частиц, а не одним из семейств.* Кварки выступают в качестве истинно элементарных частиц, тогда как все адроны не элементарны, а являются составными частицами. На этом пути из возможных мультиплетов отбираются лишь следующие: 1, 8, 10. Они действительно обнаруживаются в природе и получают свое объяснение, подобно изотопическому спину, например такие параметры, как странность и гиперзаряд; делаются некоторые заключения о спектре масс в мультиплете.

## Приложение I

### *Сингулярная дельта-функция Дирака*

**1.** $\delta(x)=\begin{cases}\infty, & x=0,\\ 0, & x\neq 0,\end{cases}$

$$\int_a^b \delta(x)\,dx=1,\quad a\leqslant 0\leqslant b$$

определение δ-функции.

**2.** $\int_a^b f(x)\,\delta(x)\,dx=f(0)$, $a\leqslant 0\leqslant b$, или $\int_c^d f(x)\,\delta(x-\alpha)\,dx=f(\alpha)$, $c\leqslant\alpha\leqslant d$ — основное свойство δ-функции.

**3.** $\lim_{\alpha\to\infty}\frac{\sin\alpha x}{\pi x}=\delta x$

одно из аналитических выражений δ-функции.

**4.** $\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dk=\delta(x)$.

**5.** $\delta(-x)=\delta(x)$, $x\delta(x)=0$, $\delta'(-x)=-\delta'(x)$, $x\delta'(x)=-\delta(x)$, $\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)$ — важные свойства δ-функции.

**6.** $\delta(x,\ y,\ z)\equiv\delta(\vec{r})=\delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$ — трехмерное обобщение δ-функции.

**7.** $\int F(\vec{r})\,\delta(\vec{r})\,d\vec{r}=F(0)$, $\int \vec{F}(\vec{r})\,\delta(\vec{r}-\vec{a})\,d\vec{r}=\vec{F}(\vec{a})$ — основное свойство трехмерной δ-функции.

**8.** $\delta(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{k}\vec{r}}d\vec{r}$ — разложение δ-функции в интеграл Фурье.

**9.** $\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\vec{r})$.

Последнее равенство показывает, что $\frac{1}{r}$ есть решение уравнения $\Delta U = 0$ везде, кроме точки $\vec{r} = 0$.

## Приложение II

### *Матрицы и действия с ними*

*Матрица* — это табличка с упорядоченным расположением элементов по столбцам и строкам. Применяются квадратные матрицы, у которых число строк и столбцов совпадает, матрицы-столбцы и матрицы-строки. Элементы квадратной матрицы $A$ обозначаются той же буквой, но с индексами — $A_{ik}$ (первый индекс — строка, второй — столбец):

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1}A_{1,2}\ldots A_{1n} \\ A_{2,1}A_{2,2}\ldots A_{2n} \\ \ldots\ldots\ldots \\ A_{n1}A_{n2}\ldots A_{nn} \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы-столбца или матрицы-строки имеют один индекс:

$$C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}, \quad C = (C_1 C_2 \ldots C_n).$$

Далее предполагается, что ранг складываемых или перемножаемых матриц (число строк или столбцов) одинаков и элементами матриц являются комплексные числа.

Матрицы можно складывать друг с другом: $C = A + B$, если $C_{ik} = A_{ik} + B_{ik}$; умножать на число: $B = \lambda A$, если $B_{ik} = \lambda A_{ik}$.

Матрица $C = A \cdot B$ является произведением матриц $A$ и $B$, если $C_{ik} = \sum\limits_s A_{is}B_{sk}$. Перемножая квадратные матрицы, получаем квадратную матрицу того же ранга:

$$\square \cdot \square = \square.$$

Имеет смысл умножение квадратной матрицы на матрицу-столбец:

$$\square \cdot \square = \square.$$

матрицы-строки на квадратную матрицу:

$$\square \cdot \square = \square.$$

Умножение строки на столбец и столбца на строку дает число

$$\square \cdot \square = \text{число}, \quad \square \cdot \square = \text{число}.$$

Операция умножения матриц в общем случае некоммутативна.

Среди квадратных матриц выделяют нулевую матрицу: $0_{ik} = 0$. Очевидно, что $A + 0 = A$, $A \cdot 0 = 0$. Важное значение имеет единичная матрица I. Она обладает свойствами: $A \cdot \mathrm{I} = \mathrm{I} \cdot A = A$. Ее элементы определяются равенством $\mathrm{I}_{ik} = \delta_{ik}$.

Единичная матрица является частным случаем диагональной матрицы. Так называется матрица вида

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Матрица $A^{-1}$ называется обратной матрицей к матрице $A$, если $A^{-1}\cdot A=1$. (Заметим, что $A^{-1}\cdot A=A\cdot A^{-1}$.) Элементы обратной и прямой матриц связаны соотношением

$$(A^{-1})_{ik}=(-1)^{i+k}\frac{D_{ki}}{\Delta(A)}.$$

Здесь $\Delta(A)$ — определитель, составленный из элементов матрицы $A$; $D_{ki}$ — минор, получающийся вычеркиванием из определителя $k$-й строки и $i$-го столбца. Очевидно, что матрицы с $\Delta=0$ не имеют обратных матриц.

Матрица $\tilde{A}$ с элементами $\tilde{A}_{ik}=A_{ki}$ называется транспонированной (по отношению к матрице $A$). Она получается из матрицы $A$ перестановкой строк и столбцов.

Матрица $A^{+}$ с элементами $A^{+}_{ik}=A^{*}_{ki}$ называется сопряженной к матрице $A$. Если матрица $A^{+}=A^{-1}$, то матрица $A$ называется унитарной. Поскольку $\Delta(AB)=\Delta(A)\cdot\Delta(B)$ и $\Delta(A^{+})=[\Delta(A)]^{*}$, определитель унитарной матрицы удовлетворяет соотношению

$$|\Delta(A)|^2=1.$$

Легко доказать: $(\widetilde{AB})=\tilde{B}\tilde{A}$, $(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$, $(AB)^{+}=B^{+}A^{+}$.

## Приложение III

### *Элементы теории представлений*

Использование математического аппарата, адекватного физическим объектам, позволяет достаточно просто и логически стройно изложить соответствующую физическую теорию, расширяет возможности ее применения, способствует глубокому пониманию ее идей. Использованный ранее математический формализм волновых функций и действующих на них функциональных операторов является частным случаем более общего описания квантовых систем на языке понятий линейной алгебры.

В нашем курсе в основном применялось координатное представление функции состояния и операторов физических величин. Оно является не только наглядным, но и наиболее исчерпывающим для описания пространственного распределения микрочастиц. Однако в релятивистской области взаимодействий микрочастиц координатное представление теряет смысл, поэтому используются импульсное и энергетическое. Они и в нерелятивистской области в ряде случаев позволяют выяснить необходимые детали взаимодействия.

По указанным причинам учебная книга, посвященная квантовой механике, не может считаться полной без изложения теории представлений; основы этой теории и изложены в нижеследующем приложении.

## Векторы и операторы в гильбертовом пространстве

### 1. Векторы в линейном векторном пространстве

Векторами могут быть различные математические объекты, для которых определены операции сложения и умножения вектора на комплексное число. Множество векторов образует линейное векторное (комплексное) пространство, если любая линейная комбинация векторов из этого множества есть вектор, входящий в данное множество.

Вектор как элемент линейного векторного пространства в квантовой механике обозначается символом $|>$ и называется кет-вектором или просто *кет*. Чтобы различать векторы пространства между собой, используются буквы или индексы, которые могут пробегать как дискретный, так и непрерывный ряды значений. Так, для дискретного множества применяется обозначение $|n>$, где $n=1, 2, 3, \ldots$, для непрерывного $|x>$; непрерывная переменная величина $x$ изменяется в некотором конечном или бесконечном интервале. Используются и другие обозначения, отражающие (или оставляющие без внимания) дискретный или непрерывный характер множества векторов: $|u_n>$ и $|u>$, $|\psi(x)>$ и $|\psi>$ и т. д.

Уточним определения сложения векторов и умножения вектора на число. Сложение векторов есть операция, в результате которой двум векторам $|a>$ и $|b>$ сопоставляется третий вектор $|c>=|a>+|b>$. Умножение вектора $|a>$ на комплексное число $\alpha$ определяет вектор $|b>=\alpha|a>$. Для этих операций постулируются свойства:

$$
\left.\begin{array}{l}
1)\ |a>+|b>=|b>+|a>; \\
2)\ (|a>+|b>)+|c>=|a>+(|b>+|c>); \\
3)\ 1\cdot|a>=|a>; \\
4)\ (\alpha+\beta)|a>=\alpha|a>+\beta|a>; \\
5)\ \alpha(\beta|a>)=\alpha\beta|a>; \\
6)\ \alpha(|a>+|b>)=\alpha|a>+\alpha|b>, \\
7)\ \text{множество содержит нулевой вектор, такой, что} \\
\qquad |a>+0=|a>; \\
8)\ \text{для каждого } |a> \text{ существует } |-a>, \text{ такой, что} \\
\qquad |a>+|-a>=0
\end{array}\right\} \qquad (1)
$$

Названные свойства или правила действий с векторами справедливы, например, для обычных (геометрических) векторов, матриц и комплексных функций действительного переменного. Поэтому из указанных объектов можно построить линейные векторные пространства.

Линейные комбинации векторов записываются в виде суммы:

$$
|u>=\sum_n c_n|n>, \qquad (2)
$$

или интеграла:

$$|u> = \int c(k)|k> dk, \qquad (3)$$

где $c_n$ — в общем случае комплексные числа, а $c(k)$ — комплексная функция непрерывного аргумента $k$. По определению линейного векторного пространства, если $|n>$ — векторы этого пространства, а $c_n$ — произвольные комплексные числа, то $|u>$ также вектор пространства, причем в ряд (2) входит произвольное число слагаемых.

Возьмем несколько векторов. Если ни один из них нельзя выразить линейной комбинацией всех других, то говорят, что эти векторы линейно независимы.

В этом случае из равенства

$$\lambda_1 |a_1> + \lambda_2 |a_2> + ... = 0$$

следует, что $\lambda_1 = \lambda_2 = .. = 0$. В противном случае векторы $|a_1>$, $|a_2>$ и т. д. линейно зависимы и один из них может быть выражен в виде линейной комбинации остальных. Например,

$$|a_1> = -\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|a_2> - \frac{\lambda_3}{\lambda_1}|a_3> ..$$

Если линейное векторное пространство содержит максимум $n$ независимых векторов, то это конечномерное пространство, и число его измерений равно $n$. Всякий вектор в этом пространстве может быть представлен в виде линейной комбинации $n$ линейно независимых векторов, образующих базис. Базисные векторы можно выбрать бесконечным числом различных способов.

Существуют линейные векторные пространства, в которых число независимых векторов неограниченно. В них базис представляет собой бесконечную (счетную или континуальную) последовательность векторов. Другие векторы в таких пространствах находятся как линейные комбинации (в виде бесконечных рядов или интегралов) векторов базиса. При этом должны быть учтены все векторы базиса, т. е. взята полная их система.

Пусть базис составляет система линейно независимых векторов $|e_1>$, $|e_2>$... или (в случае бесконечномерного пространства) взята полная система базисных векторов. Тогда любой вектор линейного векторного пространства выражается суммой:

$$|a> = \alpha_1 |e_1> + \alpha_2 |e_2> + ... \qquad (4)$$

При этом бесконечная сумма в правой части (4) сходится к вектору $|a>$. Совокупность чисел $\alpha_1$, $\alpha_2$, ... является координатами вектора в системе координат, определяемой базисом $|e_1>$, $|e_2>$, ...

## 2. Унитарное и гильбертово пространства

Комплексное пространство называется унитарным, если в нем определена операция скалярного произведения, ставящая в соответствие каждой паре векторов $|a>$ и $|b>$ комплексное число

$<a|b>$. Постулируются следующие свойства скалярных произведений векторов:

1) $<a|b>^*=<b|a>$ — эрмитова симметрия; (5)

2) $<a|b+c>=<a|b>+<a|c>$ — закон дистрибутивности; (6)

3) $<a|\alpha b>=\alpha<a|b>$ — закон ассоциативности; (7)

4) $<a|a>\geqslant 0$ — положительная определенность нормы вектора (8)

Из (5), (6) и (7) следуют, в частности, равенства

$$\left.\begin{aligned} <a|\sum_i \beta_i b_i> &= \sum_i \beta_i <a|b_i>, \\ \sum_i <\alpha_i a_i|b> &= \sum_i \alpha_i^* <a_i|b>. \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

Первое равенство выражает линейность скалярного произведения по второму сомножителю, а второе можно назвать свойством антилинейности по первому сомножителю.

Скалярный квадрат вектора называется нормой или квадратом модуля вектора:

$$a^2=<a|a>.$$

С помощью свойства (5) находим, что $(a^2)^*=a^2$ — вещественное число; свойство (8) приводит к вещественности $a$.

В квантовой механике используются унитарные векторные пространства, как бесконечномерные, так и с конечным числом измерений. Для бесконечномерных пространств имеют место две особенности: 1) норма вектора в бесконечномерном пространстве может быть как конечным числом, так и бесконечной величиной; 2) пространство может быть полным, т. е. содержать все необходимые векторы для разложения любого своего вектора в сумму (2) или (3), но может быть и неполным, и тогда упомянутые равенства смысла не имеют. Математической основой для наиболее общей формулировки законов квантовой механики являются бесконечномерные полные унитарные пространства с конечной нормой для всех векторов. Это гильбертовы пространства. Таким образом, гильбертово пространство есть бесконечномерное полное линейное векторное пространство со скалярным произведением и конечной нормой. Сложные математические вопросы полноты мы оставляем без рассмотрения. Далее полнота обеспечивается во всех необходимых случаях.

В конечномерном унитарном пространстве можно выбрать ортогональную систему линейно независимых векторов с единичными модулями:

$$<e_i|e_k>=\delta_{ik}. \tag{10}$$

Из условия ортогональности векторов $|e_i>$ в разложении (2) можно найти все коэффициенты — координаты вектора. В самом деле, умножая равенство

$$|a>=\sum_i \alpha_i|e_i> \tag{11}$$

слева скалярно на $|e_k>$, получим

$$\alpha_k = \langle e_k | a \rangle. \tag{12}$$

Координаты вектора в ортонормированном базисе называются его проекциями. Совокупность проекций вектора дает исчерпывающую информацию о нем, т. е. вектор при известном базисе может быть задан как упорядоченная совокупность (табличка, матрица) своих проекций.

Сказанное относится и к гильбертову пространству, однако число векторов его полного базиса бесконечно. Бесконечно соответственно и число проекций вектора.

Найдем выражение скалярного произведения двух векторов через их проекции в ортонормированном базисе. Пользуясь равенством (11) и свойствами скалярного произведения (6) и (9), имеем

$$\langle a | b \rangle = \sum_{i,\,k} \alpha_i^* \beta_k \langle e_i | e_k \rangle.$$

С учетом ортонормированности векторов базиса (10) получаем важнейшую формулу для расчета скалярного произведения:

$$\langle a | b \rangle = \sum_i \alpha_i^* \beta_i. \tag{13}$$

Скалярный квадрат, или норма вектора (8), выражается аналогичной формулой

$$\langle a | a \rangle = \sum_i \alpha_i^* \alpha_i. \tag{14}$$

Для гильбертова пространства бесконечный ряд в правой части формулы (14) сходится к конечному вещественному числу.

В квантовой механике в ряде задач оказывается необходимым использовать в качестве базисных такие векторы, норма которых не является конечным числом: $\langle e_i | e_i \rangle = \infty$, т. е. векторы не гильбертова пространства. Не вдаваясь в математические подробности, укажем только, что во всех таких случаях система базисных векторов оказывается непрерывной, и она нормируется на $\delta$-функцию Дирака:

$$\langle k | k' \rangle = \delta (k - k'). \tag{15}$$

Любой вектор гильбертова пространства может быть представлен через векторы базиса (15) разложением (3). Коэффициенты разложения находятся по формуле

$$c (k) = \langle k | u \rangle. \tag{16}$$

Обобщаются на непрерывный базис и формулы (13), (14) для расчета скалярного произведения в проекциях:

$$\langle u | v \rangle = \int c^* (k)\, F (k)\, dk, \quad F (k) = \langle k | v \rangle, \tag{17}$$

$$\langle u | u \rangle = \int c^* (k)\, c (k)\, dk, \tag{18}$$

причем несобственные интегралы здесь должны быть сходящимися.

### 3. Сопряженные векторы

Роль сомножителей $|a>$ и $|b>$ в скалярном произведении $<a|b>$ неодинакова, что видно из формулы (13). В связи с этим $<a|b>$ можно рассматривать как произведение двух векторов разного типа: кет-вектора $|b>$ и так называемого бра-вектора $<a|$:

$$<a|b> = <a| \cdot |b>.$$

Бра-вектор $<a|$ считается сопряженным вектору $|a>$. Процедура сопряжения зависит от конкретного смысла кет-векторов как математических объектов. Сопряжение, или эрмитово сопряжение, будем обозначать следующим образом:

$$|a>^{+} = <a|. \tag{19}$$

Операции сопряжения и умножения бра-вектора на кет-вектор выбирается в соответствии с определением и свойствами скалярного произведения векторов (см. (5)...(9)). В этом смысле скалярное произведение задает взаимно однозначное соответствие между сопряженными векторами. Из соотношения (19) следует $<a|^{+} = |a>$. Если $|a> = \sum_i \alpha_i |e_i>$ и $|b> = \sum_i \beta_i |e_i>$, то на основании формулы (13) получаем выражение для скалярного произведения в проекциях:

$$<b|a> = \sum_i \beta_i^* \alpha_i.$$

Величина произведения не зависит от выбора базиса. Поэтому разложению по кет-векторам $|e_i>$ сопоставляется разложение $<a|$ по сопряженным бра-векторам $<e_i|$:

$$<a| = \sum_i \alpha_i^* <e_i|.$$

Аналогичным образом для непрерывного множества векторов базиса имеем, кроме

$$|u> = \int c(k)|k> dk,$$

разложение

$$<u| = \int c^*(k) <k| dk.$$

Все сказанное позволяет утверждать, что функционал $<a|b>$ при фиксированном $|b>$ порождает новое линейное векторное пространство $<a|$, которое называется сопряженным исходному векторному пространству. Каждому вектору $|a>$ ставится во взаимно однозначное соответствие вектор $<a|$. Ортонормированному базису $|e_i>$ в сопряженном пространстве отвечает ортонормированный базис $<e_i|$. Всякая линейная комбинация кет-векторов $\sum_i \alpha_i |a_i>$ переходит в антилинейную $\sum_i \alpha_i^* <a_i|$. Оба пространства идентичны

по свойствам, но это два разных пространства: бра- и кет-векторы нельзя складывать.

### 4. Два частных вида гильбертовых пространств, используемых в квантовой механике

Совокупность матриц-столбцов:

$$u=\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{20}$$

где $u_i$ — комплексные числа, образует линейное векторное пространство, так как матрицы можно складывать друг с другом и умножать на комплексное число, причем эти операции обладают постулированными свойствами (1). Число элементов матрицы может быть как конечным, так и бесконечным.

Пространство кет-векторов (20) является унитарным, так как в нем можно задать операцию скалярного произведения:

$$|a>=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix},\ |b>=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix},\ <a|b>=\sum_i a_i^* b_i. \tag{21}$$

При таком определении произведения векторов выполняются требования (5)...(8).

Данное пространство будет гильбертовым, если для любого вектора $|u>$ сумма

$$\sum_i u_i^* u_i$$

есть конечное число.

Совокупность матриц

$$|1>=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ . \end{pmatrix},\quad |2>=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ . \\ . \end{pmatrix},\ \ldots$$

образует ортонормированный базис. В нем для вектора $|u>$ имеем

$$|u>=u_1|1>+u_2|2>+\ldots$$

При действиях с матрицами вводится понятие о матрице $A^+$, эрмитово сопряженной матрице $A: A_{ik}^+=A_{ki}^*$. Матрицу-строку $(a_1^*, a_2^*, \ldots)$, эрмитово сопряженную матрице-столбцу $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$, назовем бра-вектором $<a|$, сопряженным кет-вектору $|a>$. Это оказывается возможным потому, что произведение $<a|b>$ вычисляется по правилу умножения матриц ($C=AB$, если $C_{ik}=\sum_s A_{is}\cdot B_{sk}$), совпадает со скалярным произведением (21).

Частный случай комплексного векторного пространства матриц-столбцов был использован нами при изучении спина электрона. Спиновые функции $|u>=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ образуют двумерное унитарное пространство с базисом:

$$u\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\quad u\left(-\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Возвратимся к заданию векторов гильбертова пространства с помощью их проекций (см. п. 2 этого приложения). Поскольку вектор при известном базисе полностью определяется упорядоченной совокупностью комплексных чисел-проекций этого вектора, то рассмотренные сейчас матрицы-столбцы могут считаться аналитической формой задания векторов дискретного множества. Соответственно матрицы-строки выражают сопряженные векторы. Формула скалярного произведения векторов в проекциях (13) отвечает правилу матричного умножения «строка на столбец». В этой связи рассмотренная в первом примере гильбертова пространства совокупность матриц-столбцов или матриц-строк есть в то же время и общее аналитическое представление (в числах) гильбертова пространства векторов, определенных ранее, в п. 1, аксиоматически.

Множество однозначных, непрерывных и квадратично-интегрируемых комплексных функций $\varphi(x)$, $f(x)$, ... образует бесконечномерное (гильбертово) пространство. Если $\varphi(x)$ есть кет-вектор $|\varphi>$, то комплексно-сопряженная ей функция $\varphi^*(x)$ есть соответствующий бра-вектор $\langle\varphi|$. Скалярное произведение определяется интегралом:

$$\langle\varphi|f\rangle=\int\varphi^*(x)\,f(x)\,dx. \tag{22}$$

В качестве базиса выбирается любая полная ортонормированная система функций $\varphi_k(x)$. Разложению функций по векторам базиса отвечает разложение в обобщенный ряд Фурье. Соответственно проекции вектора $|\psi\rangle$, данного разложением

$$|\psi(x)>=\sum_k c_k|\varphi_k(x)>,$$

находятся как коэффициенты Фурье, т. е.

$$c_k=<\varphi_k|\psi>=\int\varphi_k^*(x)\,\psi(x)\,dx.$$

В случае непрерывного базиса, нормированного на $\delta$-функцию, имеем разложение в интеграл Фурье:

$$|\psi(x)>=\int c(k)\,\varphi(k,\,x)\,dk,$$

где $c(k)$ есть Фурье-образ функции $\psi$:

$$c(k)=<\varphi(k,\,x)|\psi(x)>=\int\varphi^*(k,\,x)\,\psi(x)\,dx.$$

Из сказанного следует, что математический формализм $\psi$-функций, применявшийся на протяжении всего курса, сводится к

случаю так называемого координатного представления векторов состояния $|\psi(x)>$, при котором ортонормированный базис составляют векторы $|\delta(x-x')>$. В этом базисе проекции вектора $\psi(x)$ на оси в соответствии с формулой (22) будут такие:

$$\int \psi(x')\,\delta(x-x')\,dx' = \psi(x),$$

т. е. получим непрерывную матрицу-столбец значений $\psi(x)$.

Выше рассмотрено так называемое функциональное пространство. В нем функции можно формально свести к матрицам, если рассматривать матрицы-столбцы и матрицы-строки с непрерывно переходящими друг в друга элементами (матрицы-столбцы с непрерывной числовой последовательностью элементов по строкам и матрицы-строки с непрерывной числовой последовательностью по столбцам). Соответственно каждое значение функции $\psi(x)$ — вектора гильбертова пространства — есть проекция этого вектора на векторы базиса $\delta(x-x')$ и в то же время элемент непрерывной матрицы-строки или столбца. В дираковских обозначениях кет-вектор $|\psi(x)>$ оказывается матрицей, индекс строки которой является непрерывным аргументом $x$. Такой подход значительно расширяет возможности применения дираковских обозначений «бра» и «кет» для векторов гильбертова пространства. В частности, все формулы приобретают матричный смысл.

## 5. Операторы в линейном векторном пространстве

В главе III рассмотрено понятие о линейном операторе $\widehat{L}$, действующем на $\psi$-функцию. Поскольку $\psi$-функции могут рассматриваться как векторы гильбертова пространства, то целесообразно обобщение понятия о функциональном операторе на операторы, действующие в линейном векторном пространстве. Ниже такое обобщение выполняется в очень краткой форме, так как все основные сведения об операторах уже изложены в § 7.

Предположим, что имеется правило, по которому вектору $|u>$ ставится во взаимно однозначное соответствие некоторый вектор $|v>$. Про это говорят, что вектор $|v>$ получается из вектора $|u>$ в результате действия оператора $A$. (Здесь операторы обозначены только большими латинскими буквами без значка «$\wedge$».) Можно записать, что

$$|v> = A|u>. \tag{23}$$

Далее будут рассматриваться только линейные операторы, для которых

$$A(c_1|a> + c_2|b>) = c_1 A|a> + c_2 A|b>.$$

Определим сумму операторов: $M = A + B$, если

$$A|a> + B|a> = M|a>.$$

Оператор $M$ есть произведение операторов $A$ и $B$, если

$$A(B|a>)=M|a>.$$

Значит, при выполнении данного равенства $M=AB$. Произведение операторов в общем случае некоммутативно, т. е. $AB\neq BA$.

Символом I обозначается единичный оператор:

$$I|a>=|a>. \tag{24}$$

Заметим, что $I\cdot A=A\cdot I$ для любого оператора.

Оператор $A^{-1}$ называется обратным по отношению к оператору $A$, если

$$A^{-1}A=AA^{-1}=I. \tag{25}$$

Операторы $A$ и $A^{-1}$ коммутируют. (Но не все операторы имеют обратные к ним операторы.)

Скалярное произведение векторов $|b>$ и $A|a>$ записывается в виде

$$<b|A|a>.$$

Оператор $A^{+}$ называется сопряженным оператору $A$, если

$$<b|A^{+}|a>=<a|A|b>^{*}. \tag{26}$$

Для самосопряженных или эрмитовых операторов $A=A^{+}$.

Нам потребуются далее унитарные операторы, для которых $A^{+}=A^{-1}$ и, следовательно, $A^{+}A=AA^{+}=I$.

В заключение укажем два полезных соотношения, доказательство которых предлагается читателю в качестве задачи:

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1},\ (AB)^{+}=B^{+}A^{+}.$$

## 6. Собственные векторы и собственные значения операторов

Если выполняется равенство

$$A|a>=a|a>, \tag{27}$$

то вектор $|a>$ называется собственным вектором оператора $A$, а число $a$ — его собственным значением. Если равенству (27) удовлетворяет несколько линейно независимых собственных векторов $|a_{\nu}>$, то собственное значение называется вырожденным:

$$A|a_{\nu}>=a|a_{\nu}>;\ \nu=1,\ 2,\ \ldots,\ f,$$

где $f$ — кратность вырождения.

Можно показать, что коммутирующие операторы имеют общую систему собственных векторов.

Можно также показать, что собственные векторы эрмитового оператора попарно ортогональны. Выбрав условие нормировки, получим ортонормированную систему собственных векторов.

Самосопряженный оператор может иметь как дискретный, так и непрерывный спектры. (Случай смешанного спектра для упрощения записей не рассматривается.)

Если спектр дискретен, то

$$A|i> = a_i|i>$$

и

$$<k|i> = \delta_{ik}.$$

Если спектр непрерывен, то

$$A|a> = a|a>$$

и

$$<a|a'> = \delta(a-a'),$$

где $\delta(a-a')$ — δ-функция Дирака.

Система собственных векторов эрмитовых операторов, применяемых в квантовой механике, является полной, т. е. для любого гильбертова вектора $|u>$ справедливо разложение

$$|u> = \sum_i c_i|i>,$$

или

$$|u> = \int c(a)|a>da,$$

где $|i>$ или $|a>$ — собственные векторы самосопряженного оператора $A$.

Из сходимости разложений к раскладываемому вектору следуют соотношения

$$<u|u> = \sum_i c_i^* c_i, \quad <u|u> = \int c^*(a)\, c(a)\, da. \tag{28}$$

Они называются условиями полноты и замкнутости. Справедливо и обратное: если эти условия выполняются, то указанные разложения сходятся в среднем, например,

$$\left| |u> - \sum_i c_i|i> \right|^2 = 0. \tag{29}$$

Очевидно, что система собственных векторов эрмитова оператора может быть принята за базис системы координат в гильбертовом пространстве.

В приложениях часто используются операторы:

$$I = \sum_i |i><i|$$

и

$$I = \int da|a><a|. \tag{30}$$

Их смысл определяется соотношениями

$$I|u> = \sum_i |i><i|u> = \sum_i u_i|i> = |u>,$$

$$I|u> = \int da|a><a|u> = \int c(a)|a>da = |u>.$$

Поэтому в гильбертовом пространстве операторы (30) совпадают с единичным оператором.

## Векторы и операторы в F-представлении

### 1. Векторы в F-представлении

Выберем в качестве базиса в линейном векторном пространстве совокупность собственных векторов любого самосопряженного оператора $F$. Для простоты предполагаем спектр оператора дискретным. Вектор $|i>$ есть собственный вектор, принадлежащий собственному значению $f_i$. (Для перехода к непрерывному спектру нужно везде суммирование заменить интегрированием.)

Разложим произвольный вектор по векторам базиса:

$$|a>=\sum_i <i|a>|i>=\sum_i a_i|i>.$$

Числа $a_i=<i|a>$ расположим в виде матрицы-столбца:

$$|a_f>=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Множество таких матриц образует линейное векторное пространство, находящееся во взаимно однозначном соответствии с исходным. Вектору $|a>$ сопоставляется вектор в матричном пространстве $|a_f>$. Свойства нового пространства совпадают со свойствами взятого первоначально. Поэтому говорят, что множество векторов $|a_f>$ образует представление исходного векторного пространства. Вектор $|a_f>$ есть вектор $|a>$ в $F$-представлении.

Если кет-вектору $|a>$ в $F$-представлении сопоставляется матрица-столбец $|a_f>$, то сопряженный ему бра-вектор $<a|$ в этом же представлении изображается матрицей-строкой, сопряженной к $|a_f>$:

$$<a_f|=(a_1^*,\ a_2^*,\ \ldots).$$

### 2. Операторы в F-представлении

Дано равенство

$$|b>=A|a>.$$

Разложим векторы $|b>$ и $|a>$ по векторам базиса $|f>$:

$$\sum_i <i|b>|i>=A\sum_k <k|a>|k>=\sum_k <k|a>A|k>. \qquad (1)$$

Умножим теперь равенство (1) на $|n>$. Используя ортонормированность базиса, получаем

$$<n|b>=\sum_k <k|a><n|A|k>,$$

или

$$b_n=\sum_k A_{nk}a_k,\ A_{nk}=<n|A|k>. \qquad (2)$$

Выражение (2) соответствует произведению матриц:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Матрица $\{A_{nk}\}$ переводит вектор $|a_f>$ в вектор $|b_f>$. Поэтому ее следует рассматривать как оператор $A$ в $F$-представлении:

$$|b_f> = A_{(f)}|a_f>. \tag{4}$$

По правилам действия с матрицами найдем выражение, эрмитово сопряженное к выражению (4). Получим

$$<b_f| = <a_f|A^+_{(f)}. \tag{5}$$

Элементы матрицы $A^+_{(f)}$ равны:

$$(A^+_{(f)})_{ik} = (A_{(f)})^*_{ki} = <k|A|i>^* = <i|A^+|k>. \tag{6}$$

Из равенства (5) следует, что бра-векторы в $F$-представлении преобразуются с помощью матрицы $A^+_{(f)}$, сопряженной с матрицей $A_{(f)}$. Согласно (6) матрица $A^+_{(f)}$ совпадает с матрицей оператора $A^+$, сопряженного с $A$.

Это дает основание для утверждения, что оператору $A$ в данном векторном пространстве отвечает оператор $A^+$ в сопряженном пространстве, т. е. равенству

$$|b> = A|a>$$

отвечает в пространстве бра-векторов равенство

$$<b| = <a|A^+.$$

(Операторы пишутся справа от бра-вектора, на который действуют.)

Если $A = F$, то

$$<n|A|k> = <n|F|k> = f_k<n|k> = f_k\delta_{nk}.$$

Таким образом, матрица оператора в своем собственном представлении является диагональной.

Сумме операторов $A$ и $B$ соответствует сумма матриц $A_{(f)}$ и $B_{(f)}$, произведению — произведение матриц $A_{(f)}$ и $B_{(f)}$:

$$(A+B)_{(f)} = A_{(f)} + B_{(f)},\ (AB)_{(f)} = A_{(f)}B_{(f)}.$$

### 3. Переход от одного представления к другому

Пусть $|f>$ — собственные векторы оператора $F$, а $|q>$ — собственные векторы оператора $Q$. Матрица-столбец $<f|a>$ задает вектор $|a_f>$ в $F$-представлении, а матрица-столбец $<q|a>$ есть вектор $|a_q>$, т. е. $|a>$ в $Q$-представлении. Чтобы найти связь

между двумя указанными представлениями, разложим векторы $|f>$ по новому базису $|q>$:

$$|f>=\sum_q <q|f>|q>.$$

Тогда

$$|a>=\sum_f <f|a>|f>=\sum_f <f|a>\sum_q <q|f>|q>=$$
$$=\sum_q |q>\sum_f <q|f><f|a>.$$

Но

$$\sum_f <q|f><f|a>=<q|(\sum_f |f><f|)|a>=$$
$$=<q|I|a>=<q|a>.$$

Поэтому

$$|a>=\sum_q <q|a>|q>. \qquad (6)$$

Таким образом, мы пришли к $Q$-представлению вектора $|a>$. Запишем равенство

$$<q|a>=\sum_f <q|f><f|a>$$

в виде

$$|a_q>=\{U_{qf}\}|a_f>. \qquad (7)$$

Согласно последнему соотношению $\{U_{qf}\}$ есть оператор перехода от $F$- к $Q$-представлению. Это квадратная матрица с элементами:

$$U_{qf}=<q|f>. \qquad (8)$$

Обратное преобразование осуществляется матрицей $\{U_{fq}\}$ с элементами:

$$U_{fq}=<f|q>. \qquad (9)$$

Матрицы $\{U_{qf}\}$ и $\{U_{fq}\}$ соотносятся как прямая и обратная. Их произведение дает единичную матрицу:

$$\sum_q U_{f'q}U_{qf''}=\sum_q <f'|q><q|f''>=<f'|\Big(\sum_q |q><q|\Big)|f''>=$$
$$=\delta_{f'f''}.$$

Матрица с элементами $U^*_{ki}$ является эрмитово сопряженной по отношению к матрице $\{U_{ik}\}$. У нас

$$<f|q>^*=<q|f>.$$

Поэтому $U^+=U^{-1}$. Таким образом, переход к новому представлению осуществляется с помощью унитарной матрицы. (Заметим, что определитель, составленный из элементов унитарной матрицы, равен единице.)

## 4. Перевод оператора из F- в Q-представление

Матрицы $\{A_{q'q''}\}$ и $\{A_{f'f''}\}$ задают оператор $A$ в $Q$- и $F$-представлениях. С помощью (2) имеем

$$A_{q'q''}=\langle q'|A|q''\rangle=\langle q'|IAI|q''\rangle=$$
$$=\langle q'|\Big(\sum_{f'}|f'\rangle\langle f'|\Big)A\Big(\sum_{f''}|f''\rangle\langle f''|\Big)|q''\rangle=$$
$$=\sum_{f'}\sum_{f''}\langle q'|f'\rangle\langle f'|A|f''\rangle\langle f''|q''\rangle.$$

Если ввести матрицу $\{U_{qf}\}$ с элементами $\langle q|f\rangle$, то можно записать, что

$$A_{(q)}=\{U_{qf}\}A_{(f)}\{U_{qf}\}^{+}. \tag{10}$$

Таким образом, перевод оператора из одного представления в другое также осуществляется с помощью унитарной матрицы $\{U_{qf}\}$.

## 5. Обобщение формул перехода на непрерывный спектр

Если имеется непрерывная совокупность базисных векторов, то разложение по базису имеет вид

$$|a\rangle=\int\langle f|a\rangle|f\rangle df.$$

В $F$-представлении $|a\rangle$ отображается матрицей-столбцом с непрерывной последовательностью элементов, которые мы обозначим $|a(f)\rangle$ (или просто $a(f)$):

$$|a(f)\rangle=\langle f|a\rangle. \tag{11}$$

Произвольному оператору отвечает в $F$-представлении непрерывная квадратная матрица $\{A(f', f'')\}$ с элементами:

$$A(f', f'')=\langle f'|A|f''\rangle. \tag{12}$$

Используя формулу произведения матриц, вместо $|b\rangle=A|a\rangle$ имеем выражение

$$|b(f')\rangle=\{A(f', f'')\}|a(f'')\rangle=\int A(f', f'')|a(f'')\rangle df''. \tag{13}$$

В своем собственном представлении оператор изображается диагональной матрицей:

$$F(f', f'')=f'\delta(f'-f''). \tag{14}$$

Для перехода из $F$- в $Q$-представление применим непрерывную квадратную матрицу $\{U(q, f)\}$ с элементами $U(q, f)=\langle q|f\rangle$. Перевод вектора в $Q$-представление осуществляется с помощью формул

$$|a(q)\rangle=\{U(q, f)\}|a(f)\rangle, \tag{15}$$

или

$$|a(q)\rangle=\int U(q, f)|a(f)\rangle df. \tag{16}$$

Для перевода операторов применим соотношения

$$A_{(q)}=\{U(q, f)\}A_{(f)}\{U(q, f)\}^{+}, \tag{17}$$

или

$$A(q', q'')=\iint U(q', f')A(f', f'')U(f'', q'')df'df''. \tag{18}$$

### 6. Функции от операторов

Для операторов определены действия сложения и умножения. Поэтому функцию оператора можно задать через степенной ряд:

$$\varphi(A)=\sum_{i=0}^{\infty}\alpha_i A^i. \tag{19}$$

Если $|a>$ есть собственный вектор оператора $A$, то

$$A|a>=a|a>,$$
$$A^2|a>=a^2|a>,$$
$$\ldots\ldots\ldots$$
$$A^i|a>=a^i|a>,$$

поэтому

$$\varphi(A)|u>=\Big(\sum_{i=0}^{\infty}\alpha_i A^i|a>=\varphi(a)|a>. \tag{20}$$

Чтобы найти результат действия оператора $\varphi(A)$ на произвольный вектор $|x>$, его нужно предварительно разложить по базису $|a>$.

## Некоторые представления, часто используемые в квантовой механике

### 1. Аксиоматика квантовой механики

Изложим исходные положения квантовой механики с помощью математического аппарата векторов и операторов в гильбертовом пространстве.

*Аксиома I*

Состояние системы описывается вектором абстрактного гильбертова пространства. (Абстрактность означает, что заранее математическая или физическая природа векторов не определяется.)

Следует заметить, что вектор $|u>$ описывает то же состояние, что и $c|u>$. Даже задание нормы вектора $<u|u>$ оставляет неопределенность, связанную с произвольным выбором фазового множителя.

*Аксиома II*

Физическим характеристикам системы — физическим величинам — сопоставляются линейные самосопряженные операторы, действующие в гильбертовом пространстве. При этом используются эрмитовы операторы, собственные векторы которых образуют полную ортонормированную систему, а собственные значения действительны.

*Аксиома III*

Единственно возможными результатами измерения динамической переменной $A$ являются собственные значения сопоставляемого ей оператора $\widehat{A}$.

*Аксиома IV*

Результат однократного измерения величины $A$ в общем случае неоднозначен. Вероятность — $W(a)$ — получить значение $a$ величины $A$ для системы, находящейся в состоянии $|u>$, равна $|<a|u>|^2$.

При непрерывном спектре $|<a|u>|^2$ следует рассматривать как плотность вероятности.

*Аксиома V*

Операторы координаты $\hat{x}$ и проекции импульса $\hat{p}_x$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[\hat{x},\ \hat{p}_x]=i\hbar. \tag{1}$$

Аналогичные соотношения можно записать для $\hat{y}$ и $\hat{p}_y$, $\hat{z}$ и $\hat{p}_z$.

*Аксиома VI*

Изменение среднего значения величины $A$ в состоянии $|u>$ определяется уравнением

$$\frac{d}{dt}<\widehat{A}>=<\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}>+\frac{i}{\hbar}<[\widehat{H},\ \widehat{A}]>. \tag{2}$$

(Скобки $<\ >$ используются для обозначения средних значений соответствующих величин; $\widehat{H}$ — оператор Гамильтона, оператор полной энергии системы.)

Как нетрудно видеть,

$$<\widehat{A}>=<u|\widehat{A}|u>.$$

Действительно,

$$<u|\widehat{A}|u>=<u|\widehat{A}\,(\sum_a<a|u>|a>)=<u|\sum_a<a|u>\widehat{A}|a>=$$
$$=<u|\sum_a a<a|u>|a>=\sum_a a<a|u><u|a>=$$
$$=\sum_a|<a|u>|^2a=\sum_a aW(a)=\bar{A}.$$

## 2. Изменение состояния системы со временем

Основное динамическое уравнение квантовой механики (2) допускает несколько способов описания изменения состояния системы со временем. Их называют различными представлениями или картинами эволюции системы. Выбор того или иного представления не меняет физического содержания теории и определяется соображениями математического удобства.

В шредингеровском представлении изменение состояния описывается уравнением Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|u>=\widehat{H}|u>. \tag{3}$$

Нетрудно показать, что из уравнения (3) следует уравнение (2). Продифференцируем по времени среднее значение:

$$\frac{d}{dt}<u|\hat{A}|u> = \left(\frac{\partial}{\partial t}<u|\right)\hat{A}|u> + <u|\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}|u> + \\ + <u|\hat{A}\left(\frac{\partial}{\partial t}|u>\right). \tag{4}$$

Используя самосопряженность оператора $\hat{A}$, имеем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}<u|\right)\hat{A}|u> = <u|\hat{A}\frac{\partial}{\partial t}|u>^{*}. \tag{5}$$

На основании уравнения (3)

$$\frac{\partial}{\partial t}|u> = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|u>.$$

Если подставить это выражение для производной $\frac{\partial}{\partial t}|u>$ в формулы (4) и (5) и учесть, что $(\hat{A}\hat{H})^{+} = \hat{H}^{+}\hat{A}^{+} = \hat{H}\hat{A}$, то приходим к уравнению (2).

Согласно уравнению Шредингера (3) может быть введен оператор:

$$\hat{\tau} = 1 - \frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}, \tag{6}$$

переводящий систему из состояния $|u(t)>$ в состояние $|u(t+\tau)>$, где $\tau$ — бесконечно малый промежуток времени.

Действительно,

$$\hat{\tau}|u(t)> = |u(t)> - \frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}|u(t)> = |u(t)> + \frac{\partial}{\partial t}|u(t)>\tau.$$

Оператор $\hat{\tau}$ является унитарным, так как обратный оператор:

$$\hat{\tau}^{-1} = 1 + \frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}$$

совпадает с сопряженным оператором $\hat{\tau}^{+}$.

В построении других представлений большую роль играет оператор эволюции системы $\hat{S}(0, t)$. Он переводит систему из состояния $|u(0)>$ в состояние $|u(t)>$:

$$|u(t)> = \hat{S}(0, t)|u(0)>.$$

Оператор $\hat{S}(0, t)$ можно представить как произведение многих операторов $\hat{\tau}_i$, записанных для последовательных малых интервалов времени. Поэтому он тоже является унитарным: $\hat{S}^{+} = \hat{S}^{-1}$.

В представлении Гейзенберга система описывается неизменяемым с течением времени вектором $|u_{\Gamma}>$. Эволюция системы связана с тем, что от времени зависят операторы всех физических величин. Из соотношения для средних (2) в этом случае следует

$$\frac{d\hat{A}_{\Gamma}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_{\Gamma}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\Gamma}, \hat{A}_{\Gamma}].$$

Это равенство нужно понимать как определение оператора $\frac{d\hat{A}_{\Gamma}}{dt}$.

Связь между шредингеровской и гейзенберговской картиной развития системы осуществляется унитарным преобразованием, производимым с помощью оператора эволюции $\widehat{S}(0, t)$. Полагаем

$$|u_{\text{г}}> = \widehat{S}^{+}|u_{\text{ш}}(t)> \tag{7}$$

и

$$\widehat{A}_{\text{г}} = \widehat{S}^{+}\widehat{A}_{\text{ш}}\widehat{S}.$$

С помощью простых преобразований можно показать, что

$$|u_{\text{г}}> = |u_{\text{ш}}(0)> \tag{8}$$

и

$$<a_{\text{г}}|\widehat{A}_{\text{г}}|b_{\text{г}}> = <a_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}|b_{\text{ш}}>. \tag{9}$$

Первое равенство прямо следует из формулы (7) и унитарности оператора $\widehat{S}(0, t)$.

Для доказательства формулы (9) используем соотношение (7) и тождество $(AB)^{+} = B^{+}A^{+}$:

$$<a_{\text{г}}|\widehat{A}_{\text{г}}|b_{\text{г}}> = <a_{\text{г}}|\widehat{S}^{+}A_{\text{ш}}S|b_{\text{г}}>,$$

но

$$\widehat{S}|b_{\text{г}}> = \widehat{S}\widehat{S}^{+}|b_{\text{ш}}> = |b_{\text{ш}}>,$$

поэтому

$$<a_{\text{г}}|\widehat{A}_{\text{г}}|b_{\text{г}}> = <a_{\text{г}}|\widehat{S}^{+}A_{\text{ш}}|b_{\text{ш}}> = <b_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}S|a_{\text{г}}>^{*} =$$
$$= <b_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}|a_{\text{ш}}>^{*} = <a_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}|b_{\text{ш}}>.$$

На последнем шаге учтена эрмитовость оператора $\widehat{A}$.

Из равенства (9) следует, что в гейзенберговском представлении сохраняют свои значения матричные элементы операторов, их собственные значения, скалярные произведения векторов, вероятности отдельных значений физических величин, их средние значения. Это доказывает полную эквивалентность обоих представлений: шредингеровского и гейзенберговского.

Если оператор Гамильтона $\widehat{H}$ не зависит от времени явно, то оператор эволюции $\widehat{S}$ может быть найден в общем виде. Подставим в уравнение Шредингера (3) вместо вектора $|u>$ выражение

$$|u> = \widehat{S}|u(0)>,$$

получим

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{S}}{\partial t}|u(0)> = \widehat{H}\widehat{S}|u(0)>.$$

В виду произвольности вектора $|u(0)>$ следует операторное уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{S}}{\partial t} = \widehat{H}\widehat{S},$$

которое имеет решение:

$$\hat{S}(0,\ t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

Другие представления, описывающие изменение физического состояния системы со временем, также получаются с помощью унитарных преобразований. Часто используется представление взаимодействия, в котором от времени зависят как векторы состояний, так и операторы физических величин. Оно удобно, если можно выделить в гамильтониане малую часть $\hat{w}$, так что

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{w}$$

и $\hat{H}_0$ не зависит от времени. Ищем решение уравнения Шредингера (3) в виде

$$|u>=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|g>.$$

После подстановки имеем

$$\hat{H}_0e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|g>+i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\frac{\partial}{\partial t}|g>=(\hat{H}_0+\hat{w})\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|g>.$$

Отсюда следует, что изменение векторов $|g>$ определяется уравнением

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|g>=\hat{v}|g>,$$

где

$$\hat{v}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{w}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}.$$

Изменение операторов определяется другим уравнением, в которое входит только $\hat{H}_0$. Как следует из уравнения (2),

$$\frac{d\hat{B}}{dt}=\frac{\partial\hat{B}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0,\ \hat{B}],$$

где

$$\hat{B}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{A}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}.$$

В конкретных расчетах оператор Гамильтона $\hat{H}_0$ описывает, например, систему невзаимодействующих частиц, а оператор $\hat{w}$ учитывает их взаимодействие. Отсюда и название представления. Представление взаимодействия очень удобно при использовании теории возмущений. Оно часто применяется в квантовой теории поля.

### 3. Координатное представление

Далее предполагается, что эволюция системы описывается уравнением Шредингера (3). В этом случае для решения практических задач часто используется координатное, или, как его еще называют, шредингеровское представление. В качестве базиса в гильбер-

товом пространстве выбираются собственные векторы оператора координаты $x$ (в трехмерном случае — общие собственные векторы операторов $\hat{x}$, $\hat{y}$ и $\hat{z}$).

Очевидно, это $\delta(\vec{r}-\vec{r}')$.

Уравнение

$$\hat{x}|x'>=x'|x'>$$

должно иметь решение при любом вещественном $x'$, так как частица может находиться в любой точке пространства. Следовательно, спектр оператора $\hat{x}$ непрерывен. Условие

$$<x'|x''>=\delta(x'-x'')$$

выражает ортонормированность базиса.

Состояние системы в $x$-представлении описывается непрерывной матрицей-столбцом $\psi(x)$:

$$\psi(x)=<x|\psi>,$$

где $|\psi>$ — вектор состояния системы.

Оператору $\hat{x}$ в данном представлении соответствует диагональная матрица:

$$\hat{x}_{xx'}=x\delta(x-x').$$

Действие этого оператора на вектор $\psi(x)$ определится равенством

$$\int \hat{x}_{xx'}\psi(x')\,dx'=\int x\delta(x-x')\,\psi(x')\,dx'=x\psi(x).$$

Оно сводится к умножению матрицы $\psi(x)$ на переменную $x$.

Введем оператор $\hat{p}_{xx'}$, определяемый квадратной непрерывной матрицей:

$$\hat{p}_{xx'}=-i\hbar\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x}. \tag{10}$$

Подействуем им на произвольный кет $|\psi>$, также взятый в $x$-представлении:

$$\hat{p}_{xx'}|\psi(x')>=-i\hbar\int\delta(x-x')\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx'=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

Специальная проверка показывает, что операторы $x_{xx'}$ и $\hat{p}_{xx'}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (1). Поэтому оператор $\hat{p}_{xx'}$ следует отождествлять с оператором импульса в шредингеровском представлении.

Нетрудно видеть, что в координатном представлении можно вообще отказаться от понятий о векторе и операторе, выраженных на языке линейной алгебры. Для описания достаточно использовать состояния системы функций от координат $\psi(x)$ и действующие на них функциональные операторы $\hat{x}=x$ и $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Операторы всех других величин находятся как функции от операторов координат и проекций импульса. Такой способ изложения квантовой механики был принят в предыдущих главах данного курса.

## 4. Импульсное представление

Из физических соображений спектр собственных значений оператора импульса предполагается непрерывным, поэтому матрица оператора в своем собственном представлении есть

$$\hat{p}_{pp'} = p\delta(p-p').$$

Произвольный вектор $|\psi>$ в $p$-представлении изображается матрицей-столбцом:

$$\psi(p) = <p|\psi>.$$

Действие на него оператора $\hat{p}_{pp'}$ сводится к умножению на значение импульса $p$:

$$\int p\delta(p-p')<p'|\psi> dp' = \int p\delta(p-p')\,\psi(p')\,dp' = p\psi(p).$$

Из симметрии коммутационных соотношений (1) и вида формулы (10) заключаем, что оператор $\hat{x}$ в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{x}_{pp'} = i\hbar\delta(p-p')\frac{\partial}{\partial p}.$$

Уравнение на собственные функции и собственные значения оператора импульса в координатном представлении записывается в виде

$$-i\hbar\frac{\partial\psi_p(x)}{\partial x} = p\psi_p(x) \quad (\psi_p(x) = <x|p>).$$

Нам известны его решения:

$$<x|p> = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Аналогично собственные функции и собственные значения оператора $\hat{x}$ в импульсном представлении находятся из уравнения

$$i\hbar\frac{\partial\psi_x(p)}{\partial p} = x\psi_x(p) \quad (\psi_x(p) = <p|x>).$$

Его решения:

$$<p|x> = \psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}. \tag{11}$$

Пусть известен вектор состояния (волновая функция) в координатном представлении. Переход в импульсное представление осуществляется обычным порядком (см. предыдущую часть, п. 5):

$$<p|\psi> = \int <p|x><x|\psi> dx = \int \psi_x(p)\,\psi(x)\,dx =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x)\,dx.$$

Таким образом, функции (11) играют роль матрицы перехода. С ее помощью переводятся в импульсное представление операторы физических величин. Матрица $<p|\psi>$ есть коэффициент разложения волновой функции $\psi(x)$ в интеграл Фурье по системе собственных функций оператора импульса.

## 5. Гармонический осциллятор в энергетическом представлении

В качестве примера применения энергетического представления рассмотрим задачу о гармоническом осцилляторе. Она была решена ранее (см. § 6, п. 3) в координатном представлении.

Для осциллятора оператор полной энергии имеет вид

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

С помощью подстановки

$$\xi=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

перейдем к операторам:

$$\hat{\xi}=\xi,\ \hat{p}=-i\frac{\partial}{\partial\xi}.$$

Тогда

$$\hat{H}=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{\xi}^2+\hat{p}^2).$$

Из перестановочного соотношения (1) вытекает формула

$$[\hat{\xi},\ \hat{p}]=i.$$

Введем новые операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ с помощью соотношений

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi}+i\hat{p}),\ \hat{a}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi}-i\hat{p}).$$

Теперь

$$\hat{H}=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^+ +\hat{a}^+a).$$

Коммутатор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ равен 1:

$$[\hat{a}\hat{a}^+]=1. \tag{12}$$

Поэтому гамильтониан записывается в виде

$$\hat{H}=\hbar\omega\,(\hat{n}+1/2), \tag{13}$$

где

$$\hat{n}=\hat{a}^+\hat{a}.$$

Рассмотрим подробнее некоторые свойства операторов $\hat{a}$, $\hat{a}^+$

и $\hat{n}$. Пусть $|\nu>$ — собственный вектор оператора $\hat{n}$, принадлежащий собственному значению $\nu$:

$$\hat{n}|\nu>=\nu|\nu>.$$

Определим результат действия на этот вектор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$. Из коммутационного соотношения (12) следует, что

$$\hat{n}\hat{a}=\hat{a}(\hat{n}-1),$$
$$\hat{n}\hat{a}^+=\hat{a}^+(\hat{n}+1).$$

Подействуем операторами $\hat{n}\hat{a}$ и $\hat{n}\hat{a}^+$ на кет $|\nu>$. Получаем

$$\hat{n}\hat{a}|\nu>=(\nu-1)\hat{a}|\nu>,$$
$$\hat{n}\hat{a}^+|\nu>=(\nu+1)\hat{a}^+|\nu>.$$

Отсюда видно, что

$$\hat{a}|\nu>=c_\nu|\nu-1>,$$
$$\hat{a}^+|\nu>=d_\nu|\nu+1>,$$

где $c_\nu$ и $d_\nu$ — неизвестные постоянные множители. Для нахождения $c_\nu$ вычислим двумя способами $<\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu>$:

$$<\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu>=<\nu|\hat{n}|\nu>=\nu<\nu|\nu>=\nu,$$
$$<\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu>=c_\nu<\nu|\hat{a}^+|\nu-1>=c_\nu<\nu-1|\hat{a}|\nu>^*=$$
$$=|c_\nu|^2<\nu-1|\nu-1>=|c_\nu|^2.$$

Отсюда

$$c_\nu=\sqrt{\nu}.$$

Аналогично из расчета $<\nu|\hat{a}\hat{a}^+|\nu>$ выводится значение $d_\nu$:

$$d_\nu=\sqrt{\nu+1}.$$

Векторы $|\nu>$ являются также собственными векторами гамильтониана (13). Так как энергия осциллятора — положительная величина, то $\nu\geqslant-\frac{1}{2}$. Если $\nu\geqslant\frac{1}{2}$, то

$$\hat{a}|\nu>=\sqrt{\nu}|\nu-1>.$$

Снова подействуем на это равенство оператором $\hat{a}$. Получим

$$\hat{a}^2|\nu>=\sqrt{\nu(\nu-1)}|\nu-2>,$$
$$\hat{a}^3|\nu>=\sqrt{\nu(\nu-1)(\nu-2)}|\nu-3>,$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Наконец, на $p$-м шаге мы должны получить нуль, так как значение $\nu-p$ выйдет за пределы возможного:

$$\hat{a}^p|\nu>=\sqrt{\nu(\nu-1)\ldots(\nu-p)}|\nu-p>.$$

Отсюда видно, что $\nu$ должно быть целым положительным числом или нулем.

Переход к энергетическому представлению означает, что в ка-

честве базиса выбираются собственные векторы оператора Гамильтона (13). В этом представлении матрица операторов $\widehat{H}$ и $\hat{n}$ диагональна:

$$\widehat{H}_{nm}=\hbar\omega\,(n+1/2)\,\delta_{nm},$$
$$\hat{n}_{nm}=n\delta_{nm}\,(n=0,\ 1,\ \ldots,\ m=0,\ 1,\ \ldots).$$

Состояние осциллятора описывается векторами в виде матриц-столбцов:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Из уравнения для собственных векторов и собственных значений оператора Гамильтона следует

$$\sum_m \widehat{H}_{nm}c_m=\varepsilon_n c_n.$$

Исходя из этого равенства видим, что стационарным состояниям с энергией $\varepsilon_n=\hbar\omega\,(n+1/2)$ соответствуют матрицы-столбцы:

$$|0>=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix},\quad |1>=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix},\quad |2>=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix},\quad \ldots$$

Собственные значения оператора $\hat{n}$ равны $n$, т. е. 0, 1, 2, ... Чтобы возбудить осциллятор до $n$-го квантового состояния, ему нужно передать $n$ квантов энергии величиной $\hbar\omega$. Поэтому оператор $\hat{n}$ называется оператором числа возбуждения или оператором количества квантов колебаний.

Матрицы операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ находятся из условий

$$\hat{a}|n>=\sqrt{n}\,|n-1>,$$
$$\hat{a}^+|n>=\sqrt{n+1}\,|n+1>.$$

Вычисление матричных элементов дает

$$\hat{a}^+_{mn}=\sqrt{n+1}\,\delta_{m,\ n+1},\quad \hat{a}^+_{mn}=\sqrt{n}\,\delta_{m,\ n-1},$$

или

$$\{\hat{a}_{nm}\}=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \ldots \end{pmatrix},\quad \{\hat{a}^+_{nm}\}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \end{pmatrix}.$$

Оператор $\hat{a}$ переводит систему в состояние с энергией, меньшей на один квант; напротив, оператор $\hat{a}^+$ на столько же увеличивает энергию осциллятора. Поэтому их называют операторами уничтожения и рождения кванта колебаний.

Эти операторы играют особо важную роль в теории поля. Элек-

тромагнитное поле с помощью введения специальных переменных можно представить как совокупность бесконечного числа осцилляторов с различными частотами и направлениями колебаний. При переходе к квантовому описанию поля возбуждение осциллятора до $n$-го уровня рассматривается как появление $n$ частиц с энергией $\hbar\omega$ каждая. Эти частицы и есть фотоны. Состояние поля задается через указание числа фотонов определенных частот, направлений движения и поляризаций. При таком описании оператор $\hat{n}$ играет роль оператора числа частиц данного сорта. Операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ называются соответственно операторами рождения и уничтожения фотонов. Они необходимы для описания взаимодействия поля с частицами и в других случаях, когда изменяется состояние поля.

В соответствии с этим языком энергетическое представление можно назвать представлением чисел заполнения (квантовых состояний отдельных частиц). Переход к такому описанию системы называется вторичным квантованием.

Аналогичный подход используется при изучении квантовых полей любой природы и многих других вопросов. Например, колебания кристаллической решетки также можно свести к рассмотрению системы гармонических осцилляторов. Здесь возбуждение кванта колебаний толкуется как появление особой квазичастицы — фонона. Через указание числа фононов в различных возможных для них состояниях можно передать любое квантовое состояние всей системы колеблющихся атомов в решетке.

## Упражнение X

**1.** Покажите, что $(AB)^+ = B^+A^+$.

Решение.

Пусть

$$B|y> = |z>. \tag{1}$$

Тогда

$$<x|AB|y> = <x|A|z> = <z|A^+|x>^*.$$

Допустим

$$A^+|x> = |f>. \tag{2}$$

Тогда

$$<z|A^+|x>^* = <z|f>^* = <f|z>.$$

Учитывая (1) и (2), имеем

$$<f|z> = <f|B|y> = <y|B^+|f>^* = <y|B^+A^+|x>^*.$$

Таким образом,

$$<x|AB|y> = <y|B^+A^+|x>^*,$$

но, с другой стороны,

$$<x|AB|y> = <y|(AB)^+|x>^*.$$

2. Покажите, что $(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$.

3. Покажите, что собственные значения самосопряженного оператора — действительные числа. (При доказательстве использовать дираковские обозначения векторов в линейных векторных пространствах.)

4. Покажите, что собственные векторы эрмитова оператора, принадлежащие разным собственным значениям, являются ортогональными друг другу. (Использовать дираковские обозначения для векторов.)

5. Найдите волновую функцию стационарного состояния частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками в импульсном представлении.

Р е ш е н и е.

В координатном представлении согласно данным § 5. п. 2.

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n x}{a}.$$

В импульсном представлении состояние частицы описывается матрицей-столбцом с непрерывно изменяющимся параметром $c_n(p)$. Элемент матрицы $c_n(p)$ есть коэффициент разложения:

$$\psi_n(x)=\int c_n(p)\,\varphi_p(x)\,dp,$$

где $\varphi_p(x)$ — собственная функция оператора импульса в координатном представлении:

$$\varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

По правилам разложения функций в интеграл Фурье

$$c_n(p)=\int_0^a\varphi_p^*(x)\,\psi_n(x)\,dx=\frac{1}{\sqrt{\pi a\hbar}}\int_0^a e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\sin\frac{\pi n x}{a}\,dx.$$

После вычислений получаем

$$c_n(p)=\frac{n\sqrt{\pi a}}{(\pi n)^2-\left(\frac{pa}{\hbar}\right)^2}\left[1-(-1)^n e^{-\frac{ipa}{\hbar}}\right].$$

6. Запишите волновые функции свободного движения в импульсном представлении.

Р е ш е н и е.

Оператор Гамильтона для свободного движения коммутирует с оператором импульса, поэтому волновая функция свободного движения есть собственная функция оператора импульса. В импульсном представлении это будет матрица-столбец $\delta(p-p')$.

7. Покажите, что унитарное преобразование не изменяет значений скалярных произведений векторов.

Р е ш е н и е.

Пусть $U$ — унитарный оператор: $U^{-1}=U^{+}$. Допустим, что $|a>=U|x>$, $|b>=U|y>$. Найдем скалярное произведение $<a|b>$:

$$<a|b>=<x|U^{+}U|y>=<x|y>$$

## ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ЧТЕНИЯ


1. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика.— М.: ГИФМЛ, 1959.
2. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики.— М.: Наука, 1976.
3. Давыдов А С. Квантовая механика.— М.: ГИФМЛ, 1963.
4. Данин Д. С. Нильс Бор.— М.: Молодая гвардия, 1978.
5. Дирак П. Принципы квантовой механики.— М.: Наука, 1979.
6. Иродов И. Е. Сборник задач по атомной и ядерной физике.— М.: Атомиздат, 1976.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика: Курс теоретической физики.— М.: ГИФМЛ, 1963.— Т. III.
8. Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А. Курс теоретической физики.— М.: ГИФМЛ, 1962.— Т. II.
9. Мандельштам Л. И. Лекции по оптике, теории относительности и квантовой механике.— М.: Наука, 1972.
10. Матвеев А. Н. Квантовая механика и строение атома.— М.: Высшая школа, 1965.
11. Мессиа А. Квантовая механика.— М.: Наука, 1978.— Т. I, II.
12. Мякишев Г. Я. Динамические и статистические закономерности в физике.— М.: Наука, 1973.
13. Пономарев Л. И. Под знаком кванта.— М.: Советская Россия, 1984.
14. Программы школ (классов) с углубленным теоретическим и практическим изучением физики (VIII—XI классы) // Физика в школе.— 1987.— № 1.
15. Рунов Н. Н. Строение атомов и молекул.— М.: Просвещение, 1987.
16. Серова Ф. Г., Янкина А. А. Сборник задач по теоретической физике.— М.: Просвещение, 1979.
17. Тарасов Л. В. Основы квантовой механики.— М.: Высшая школа, 1978.
18. Фейнман Р., Лейтон Р., Сендс М. Фейнмановские лекции по физике.— М.: Мир, 1967.— Т. VIII, IX
19. Физика микромира (Серия «Маленькая энциклопедия»).— М.: Советская энциклопедия, 1980.
20. Хелзен Ф., Мартин А. Кварки и лептоны.— М.: Мир, 1987.
21. Шпольский Э. В. Атомная физика.— М.: Наука, 1974.— Т. I, II

Учебное издание

**Мултановский Вячеслав Всеволодович**
**Василевский Анатолий Семенович**

**КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Зав. редакцией *В. А. Обменина*
Редактор *О. В. Серышева*
Младшие редакторы *Е. В. Казакова, О. В. Агапова*
Художники *В. С. Давыдов, О. М. Шмелев*
Художественный редактор *В. М. Прокофьев*
Технический редактор *Н. Н. Матвеева*
Корректор *М. Ю. Сергеева*

ИБ 12378

Сдано в набор 25.09.90. Подписано к печати 27.06.91. Формат $60\times90^{1}/_{16}$. Бум. офсетная № 2. Гарнит. литерат. Печать офсетная. Усл. печ. л. 20+0,25 форз. Усл. кр.-отт. 20,69. Уч.-изд. л. 19,90+0,42 форз. Тираж 22 000 экз. Заказ 891. Цена 3 р. 10 к.

Ордена Трудового Красного Знамени издательство «Просвещение» Министерства печати и массовой информации РСФСР. 129846, Москва, 3-й проезд Марьиной рощи, 41.

Саратовский ордена Трудового Красного Знамени полиграфический комбинат Министерства печати и массовой информации РСФСР. 410004, Саратов, ул. Чернышевского, 59.